

Instituto de Física ‘Gleb Wataghin’
Universidade Estadual de Campinas

Dissertação de Mestrado:

*DISSIPACÃO DE ENERGIA VIA
ACOPLAMENTO CAÓTICO:
EFEITOS QUÂNTICOS*

Fabiana Crepaldi Pereira

Orientador:

Prof. Dr. Marcus A. M. de Aguiar

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Marcus Aloízio Martinez de Aguiar (IFGW – UNICAMP)

Profa. Dra. Coraci Pereira Malta (IF – USP)

Prof. Dr. Alex Antonelli (IFGW – UNICAMP)

Profa. Dra. Kyoko Furuya (IFGW – UNICAMP) – suplente

Prof. Dr. Ricardo Egydio de Carvalho (UNESP – Rio Claro) – suplente

16 de Dezembro de 1999

Agradeço a todos aqueles que me ajudaram a tornar possível a realização desse trabalho.

Agradeço aos meus colegas do grupo de caos, pelas discussões e pela ajuda em programação. De modo especial, Sandra Prado, Murilo Tiago, Renato Angelo, Alexandre Ribeiro e Túlio De Carvalho.

Agradeço aos membros da banca, professores Marcus Aguiar, Coraci Malta e Alex Antonelli, pela atenção dada a este trabalho e pelas sugestões apresentadas. Agradeço ainda aos professores Sílvio Vitiello e Kyoko Furuya.

Agradeço, de modo muito especial, ao meu orientador, professor Marcus Aguiar, pela idéia da pesquisa, por me introduzir na fascinante área de Caos, por me conduzir e orientar durante esses anos de Mestrado, e por toda a atenção que sempre dedicou a mim e aos seus demais orientandos.

Agradeço ao pessoal da secretaria de pós-graduação, Maria Ignez, Armando, Carlos e Maria del Carmen, pelos sempre úteis esclarecimentos.

Agradeço aos amigos Adriana Fontes e Alexandre Andrade pela preciosa ajuda com o programa editor de texto.

Agradeço a todos os meus amigos, sempre presentes. De modo especial Rogério Sousa.

Agradeço aos professores e colegas do IFGW que de alguma forma foram importantes na minha formação.

Agradeço aos responsáveis pela minha educação básica, desde a alfabetização até o fim do ensino médio. Aos professores e colegas da Escola Comunitária de Campinas, em especial à Dona Amélia Palermo e à Clotilde Curado, o meu “muito obrigada”.

Agradeço ainda àqueles que tornaram tudo isso possível: minha família. Aos meus pais agradeço pela educação e apoio que me deram, pela formação que possibilitaram, e por tudo aquilo que não caberia em algumas linhas, mas em muitos volumes como este. Ao meu irmão, agradeço a ajuda na edição de figuras.

Peço desculpas por alguma injustiça que tenha cometido, por puro esquecimento. Agradeço, então, a compreensão dos ‘injustiçados’.

Agradeço à FAPESP pelo suporte financeiro.

“Olho o ovo na cozinha com atenção superficial para não quebrá-lo. Tomo o maior cuidado de não entendê-lo. Sendo impossível entendê-lo, sei que se eu o entender é porque estou errado. Entender é a prova do erro.”

(Carice Lispector, *O Ovo e a Galinha*)

Resumo

Investigamos a existência de dissipação de energia induzida por caos do ponto de vista da Mecânica Quântica. Para isso, analisamos o comportamento de um oscilador harmônico acoplado ao sistema de baixa dimensionalidade conhecido como *Nelson*. Observamos a evolução temporal de um pacote de ondas, tomando o traço nas variáveis do sistema caótico, e as energias médias de cada subsistema. Os resultados numéricos mostram um atraso na evolução do pacote compatível com o teorema adiabático. Embora não haja evidências conclusivas de dissipação, observamos oscilações na energia média do oscilador características do processo difusivo.

Abstract

We investigate the existence of energy dissipation induced by chaos from the quantum mechanical point of view. We study the behavior of a harmonic oscillator coupled to a low dimensional chaotic system known as Nelson. We look at the time evolution of a wave packet tracing out the coordinates of the chaotic system. We also look at average energies of each sub-system. The numerical results show a delay in the time evolution of the packet compatible with the adiabatic theorem. Although there are no strong evidences of dissipation, we observe oscillations in the average energy of the harmonic oscillator which are characteristic of diffusive processes.

Índice

1	Introdução	1
2	O Teorema Adiabático	5
2.1	Introdução	5
2.2	O Teorema Adiabático em Mecânica Clássica	8
2.2.1	Sistemas unidimensionais	8
2.2.2	Sistemas multidimensionais	9
2.2.3	Precisão da Invariância Adiabática e os Casos Intermediários. . .	13
2.3	O Teorema Adiabático Quântico	14
3	Os Trabalhos de Wilkinson, Berry, Robbins, Carvalho e Aguiar	17
3.1	Dissipação por Osciladores Idênticos	17
3.2	Reação Adiabática Caótica Clássica e “Meio - Clássica”	19
3.2.1	Sistema rápido clássico	20
3.2.2	Sistema rápido quântico	25
3.3	Caos Clássico Como Um Ambiente Para a Dissipação	27
4	O Potencial Nelson	31
4.1	A Forma do Potencial	31
4.2	Densidade e Número de Níveis	32
4.3	Diagonalização do Hamiltoniano Nelson	34
4.3.1	Os elementos de matriz	34

4.3.2	O cálculo numérico	38
4.4	Resultados Numéricos	39
5	O Oscilador Harmônico Acoplado ao Nelson: Três Graus de Liberdade	49
5.1	Densidade e Número de Níveis	50
5.2	Os Elementos de Matriz	53
5.3	O Cálculo Numérico	57
5.4	Resultados Numéricos	57
6	Evolução Temporal de um Pacote	61
6.1	Evolução Temporal do Pacote	64
6.2	As Energias Médias	65
6.2.1	A energia do oscilador harmônico	65
6.2.2	A energia do Nelson	66
6.2.3	A energia de interação	67
6.2.4	A energia renormalizada do oscilador harmônico	68
6.3	Resultados Numéricos	70
6.3.1	Evolução temporal do pacote	70
6.3.2	As energias médias	75
7	Conclusões	81

Capítulo 1

Introdução

A dissipação — transformação irreversível de trabalho em calor — é geralmente associada à transferência de energia de um sistema macroscópico de poucos graus de liberdade para um reservatório térmico — um sistema de muitos graus de liberdade, os quais podem ser associados a partículas (ou quase-partículas) microscópicas. Esse reservatório térmico pode ser, por exemplo, um banho de osciladores harmônicos fracamente acoplados, com distribuição contínua de frequências, como estudado por Caldeira e Leggett [1, 2], ou um banho de partículas idênticas e independentes, podendo ter dinâmica arbitrária. O primeiro modelo é adequado quando os graus de liberdade microscópicos são bósons (como átomos em uma rede, etc) enquanto que o segundo é um modelo para férmions (elétrons, por exemplo) a baixa temperatura.

Nesse trabalho estudamos o processo de dissipação de energia utilizando um modelo que difere dos citados acima principalmente porque o nosso “reservatório” não é um sistema com muitos graus de liberdade microscópicos, mas um sistema caótico com apenas dois graus de liberdade, conforme proposto por Wilkinson-Berry-Robbins [3, 4]. Neste formalismo o sistema de interesse (ainda com poucos graus de liberdade) é lento e é fracamente acoplado a um sistema caótico rápido, também de baixa dimensionalidade. Estudamos o formalismo de Wilkinson-Berry-Robbins do ponto de vista quântico, através do acoplamento de um sistema unidimensional lento ao hamiltoniano para o potencial

Nelson (o qual será apresentado detalhadamente no capítulo 4), seguindo o que foi feito *classicamente* por Túlio O. de Carvalho e Marcus A. M. de Aguiar [5, 6]. O sistema lento *por eles* utilizado teve a forma

$$H_z = \frac{p_z^2}{2} + \frac{\omega^2}{2}z^2 + \gamma z^4 \quad (1.1)$$

onde foi tomado $\omega = 0$ e $\gamma \ll 1$ para o sistema ser lento. O sistema caótico, *Nelson*, tem a forma

$$H_N = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{\mu}{2}x^2 + \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 \quad (1.2)$$

com $\mu = 0.1$. O acoplamento por eles escolhido foi

$$H_I = \lambda x z. \quad (1.3)$$

O Nelson apresenta um comportamento especial: ele é regular para energias menores que aproximadamente 0.03, fortemente caótico para energias superiores a aproximadamente 0.1 e misto para energias intermediárias.

Nós optamos, por simplicidade, por um oscilador harmônico como sistema lento

$$H_z = \frac{p_z^2}{2} + \frac{\omega^2}{2}z^2, \quad (1.4)$$

com $\omega = 0.25$ e por um acoplamento da forma

$$H_I = \lambda z \left(y - \frac{x^2}{2}\right)$$

que preserva a simetria em x , existente no Nelson, e a dependência com o termo $(y - x^2/2)$.

Apontamos acima a necessidade de que o movimento do sistema de interesse seja lento em relação ao outro. Caso isso não ocorra, enquanto o sistema lento descreve um período, o sistema caótico descreve uma pequena trajetória, que não poderá, nesse intervalo de tempo, ser diferenciada de um trecho de órbita periódica descrita por um

sistema regular. Por outro lado, sendo satisfeita essa condição, durante um período do sistema de interesse o outro sistema percorre boa parte de sua superfície de energia, revelando sua ergodicidade. É, então, justamente esta a condição para que um sistema com poucas dimensões funcione como um “reservatório”: que durante um período do sistema de interesse o outro seja mais rápido o suficiente para percorrer a superfície de energia, como ocorre num reservatório convencional. Sob tais condições, se aplica o *Teorema Adiabático*, que é de grande utilidade para o desenvolvimento desse trabalho e será apresentado no próximo capítulo.

A motivação para esta pesquisa vem, em primeiro lugar, do fato de resultados ligados à dissipação serem sempre de interesse, não só teórico mas também para eventuais aplicações que possam surgir guiadas pelos trabalhos teóricos. Nesse sentido, a abordagem diferente e pouco explorada feita nos trabalhos mencionados acima desperta o interesse. Como já foi estudado o caso clássico analiticamente por Wilkinson, Berry e Robbins e numericamente por Carvalho e Aguiar, coube-nos avaliar o problema semelhante ao estudado por esse último, também com base na análise numérica de um caso particular, mas do ponto de vista quântico.

O ponto principal do nosso trabalho foi verificar a existência ou não de dissipação quântica induzida por caos. Berry e Robbins mostraram que, em primeira ordem no parâmetro que mede a adiabaticidade não há dissipação quando o sistema caótico é quântico, embora haja no caso em que esse sistema é clássico. Tivemos o intuito de verificar se em uma situação não perfeitamente adiabática algum efeito é observado. Para estudar a dinâmica do sistema lento sujeito ao acoplamento caótico, faremos a evolução temporal de um estado inicial dado pelo produto de um estado coerente do sistema lento com um autoestado do caótico. Tomando o traço nas variáveis caóticas podemos observar a evolução do pacote de onda projetado nas coordenadas do sistema lento. Também foi estudado o comportamento dos valores médios das energias de cada subsistema em função do tempo.

Organizamos esta dissertação da seguinte forma: primeiramente faremos uma ex-

posição da teoria envolvida, começando pelo já citado Teorema Adiabático e partindo em seguida para os trabalhos anteriores, também já citados, e que são de relevância para a pesquisa aqui desenvolvida. Nos capítulos posteriores, faremos uma apresentação do sistema rápido que utilizamos: o Nelson. Em seguida, introduziremos o acoplamento com o oscilador harmônico e discutiremos os cálculos numéricos, tais como a diagonalização da matriz hamiltoniana envolvida. No capítulo seguinte focaremos na parte central do trabalho: a evolução temporal de um pacote de ondas, que deve revelar como se dá a troca de energia entre os dois sistemas. No último capítulo apresentaremos as conclusões.

Capítulo 2

O Teorema Adiabático

2.1 Introdução

Há três *Teoremas Adiabáticos*, e, de forma geral, se referem à existência de grandezas mecânicas que são invariantes (com boa aproximação) quando um sistema está sujeito a mudanças lentas (ou *adiabáticas*), exercidas por fatores externos. O primeiro deles vale para sistemas clássicos integráveis com um parâmetro que varia de forma infinitamente lenta com o tempo. Para esses sistemas, a ação parcial $\oint_{\gamma} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}$ é um invariante adiabático. Um exemplo histórico é o pêndulo com comprimento variável, que discutiremos adiante. O segundo teorema é para sistemas caóticos e ergódicos na superfície de energia com um parâmetro variando lentamente. Neste caso o volume limitado pela superfície de energia é um invariante adiabático: é o chamado *invariante adiabático ergódico*. Um exemplo é um gás em um recipiente cujas paredes se movem lentamente. O terceiro teorema diz respeito à Mecânica Quântica, e afirma que o número quântico é invariante adiabático. A invariância adiabática está ligada a fenômenos como a estabilidade do sistema solar, a origem microscópica da Segunda Lei da Termodinâmica e o limite clássico da Mecânica Quântica.

Antes de analisarmos a invariância adiabática em cada caso, discutiremos um pouco sobre a origem e o significado do termo *adiabático*, a partir da exposição histórica feita

por Keith J. Laidler [7].

A palavra *adiabático* vem do grago: *a-* não, *-dia-* através e *-bainen* passar, ou seja, *adiabático* significa *não passa através*. Em Termodinâmica, dizer que um processo é *adiabático* significa que não há troca de calor, é uma condição *imposta* sobre o sistema. Esse conceito foi desenvolvido por Carnot, em 1824, e o termo *adiabático* foi usado pela primeira vez por W. J. M. Rankine (1858). Em 1866, aos 22 anos, Boltzmann publicou um artigo no qual afirmava ter provado a Segunda Lei da Termodinâmica usando argumentos de Mecânica Clássica. Sua argumentação não era válida, mas o trabalho foi de importância, anos mais tarde, na ocasião do surgimento da Mecânica Quântica. O modelo por ele utilizado foi o de um gás no qual as moléculas se moviam periodicamente com frequências ν . Ele provou que se o gás fosse submetido a uma transformação adiabática reversível, isto é, lenta o suficiente para fenômenos irreversíveis devido à viscosidade e à fricção serem desprezíveis, E/ν se manteria constante. Essa invariância foi confirmada e reforçada por vários trabalhos posteriores. Em 1902, Lord Rayleigh considerou um pêndulo simples, com comprimento variável (exemplo clássico e histórico de invariância adiabática em sistemas de um grau de liberdade). Ele concluiu que se o comprimento variasse muito lentamente, numa escala de tempo muito mais longa que um período, de forma reversível, a energia do pêndulo iria mudar, uma vez que estaria sendo realizado trabalho sobre ele; a frequência das oscilações também mudaria, mas de modo que a razão E/ν permanecesse constante. Por outro lado, se o comprimento do fio mudasse muito bruscamente no instante em que o pêndulo estivesse na vertical, não seria realizado trabalho sobre o pêndulo, de modo que a energia permaneceria constante, mas a frequência mudaria.

Em outubro de 1911, Paul Ehrenfest estendeu a invariância de E/ν para os sistemas quantizados, afirmando que o sistema deveria permanecer no mesmo estado quântico quando sujeito a mudanças lentas e portanto E/ν era a propriedade que deveria ser quantizada, devido a sua invariância sob mudanças lentas. No fim do mesmo mês, foi realizado o Primeiro *Solvay Congress*, onde a questão da misteriosa existência da Cons-

tante de Planck $h = E/\nu$, ou, equivalentemente, a quantização da energia, foi discutida. Ehrenfest não foi convidado para esse congresso, mas Einstein, que já tinha tomado conhecimento de seu trabalho, sustentou que quando o comprimento do pêndulo é variado de forma infinitamente lenta a energia permanece igual a $h\nu$.

Pouco depois desse congresso, em 1914, a razão E/ν foi chamada de *invariante adiabático* em um artigo de Einstein. Em 1916, Ehrenfest reforçou o uso desse termo. Transcrevemos aqui um trecho da versão em inglês desse artigo, citado por Laider:

“By changing the parameters (...) in an infinitely slow way, a given motion $\beta(a)$ may be transformed into another motion $\beta(a')$. This special type of influencing upon the system may be called ‘a reversible adiabatic affection’, the motion $\beta(a)$ and $\beta(a')$ being adiabatically related to each other.” (F. Ehrenfest, *Proc. Amsterdam Acad.* **19** 576 (1916))

A partir daí, o termo *adiabático* foi usado com o sentido de muito lento, ou, mais precisamente, *reversível*. É a reversibilidade do processo que se quer enfatizar quando se fala de um processo adiabático. Neste sentido, a adiabaticidade não é mais uma condição imposta sobre o sistema, mas sim inerente a ele, uma aproximação para efeitos teóricos.

Tomemos um caso genérico: consideremos um sistema descrito pelo hamiltoniano $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \tau)$, onde usamos duas escalas de tempo: uma rápida, t , e outra lenta, $\tau = \epsilon t$, $\epsilon \ll 1$, para ressaltar que a dependência de H com o tempo é lenta. Desse modo, em um período de H podemos considerar o hamiltoniano “congelado”, isto é, para um certo τ fixo. Só será notada uma variação expressiva no sistema a partir de um tempo $T \sim \epsilon^{-1}$, chamado *tempo característico* do sistema. Essa dependência do hamiltoniano com o tempo é dita *adiabática*.

A estratégia básica de se resolver um problema usando a aproximação adiabática é resolver primeiro o problema com o parâmetro dependente do tempo fixo (o que nos referimos como mantendo o tempo ‘congelado’). A variação com o tempo é introduzida somente no resultado, no final do cálculo. Como exemplo, consideremos o período de um pêndulo simples, que é dado por $\sqrt{L/g}$. No caso em que L varie muito lentamente, podemos adotar o procedimento descrito acima, chegando a $\sqrt{L(t)/g}$.

2.2 O Teorema Adiabático em Mecânica Clássica

Os sistemas clássicos hamiltonianos podem ser divididos em três classes: sistemas integráveis, não integráveis (mistos: regiões caóticas e ilhas) e sistemas ergódicos [8, 9, 10]. Um sistema ergódico N -dimensional é não integrável e explora toda a superfície de energia de dimensão $2N - 1$, ao passo que o movimento de um sistema integrável também N -dimensional está restrito a um toro de dimensão N . O caso mais geral é o intermediário entre esses dois: um sistema não integrável que não se restringe ao toro N -dimensional, mas também não explora toda a superfície de energia, é constituído por ilhas (que nada mais são que toros) cercadas por um “mar” de caos. Um caso especial é o dos sistemas unidimensionais, que são sempre integráveis, mas ao mesmo tempo ergódicos, uma vez que o movimento cobre todo o toro, que coincide com a superfície de energia. Como consequência disso, a invariância adiabática é mais forte neste caso que nos genéricos.

2.2.1 Sistemas unidimensionais

Consideremos o hamiltoniano unidimensional $H(p, q; \tau)$, com $\tau = \varepsilon t$. Definimos a *variável de ação* por:

$$I = \oint_{\gamma} p dq \quad (2.1)$$

onde a integral fechada simboliza a integral sobre um período. Nesse caso, o *Teorema Adiabático* garante que

$$\bar{I} = O(\varepsilon^2). \quad (2.2)$$

onde a barra denota o valor médio sobre um período do movimento não perturbado [11].

No caso em que $\tau = \tau_0$, constante, o sistema pode ser descrito pelas variáveis de *ângulo e ação* (w_0, I_0) , com a variável de ângulo dada por

$$w_0 = \frac{\partial W}{\partial I_0}$$

onde $W = W(q, I_0, \tau_0)$ é a função geratriz da transformação canônica $(q, p) \rightarrow (w_0, I_0)$.

Como o hamiltoniano depende do tempo, as variáveis de ângulo e ação (w, I) não são mais constantes. Usando essas variáveis, escrevemos $H = H(I, \tau)$. Consideremos a função geratriz

$$W^*(q, w, \tau) = W(q, I, \tau) - Iw$$

Temos então o hamiltoniano nas variáveis (w, I) dada por

$$K(w, I, \tau) = H(I, \tau) + \varepsilon \frac{\partial W^*}{\partial \tau}$$

Calculemos $\dot{I}$:

$$\dot{I} = -\frac{\partial K}{\partial w} = -\varepsilon \frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{\partial W^*}{\partial \tau} \right)$$

A função W^* é periódica na variável de ângulo w com o mesmo período τ_p do movimento.

Portanto podemos escrever

$$\frac{\partial W^*}{\partial \tau} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} A_k(I, \tau) e^{2\pi i k w}$$

e logo

$$\dot{I} = 2\pi i \frac{\varepsilon}{\tau_p} \int_0^{\tau_p} dt \sum_{k=-\infty}^{\infty} A_k(I, \tau) k e^{2\pi i k w} + O(\varepsilon^2)$$

Essa integral é nula em primeira ordem em ε , pois $w \sim w_0 + \Omega t$ (com $\Omega = \partial H / \partial I$) e todos os seus termos são oscilatórios. Segue então (2.2) e o Teorema está provado [11, 12].

2.2.2 Sistemas multidimensionais

Para sistemas com mais de uma dimensão, só existem teoremas adiabáticos precisos para o caso totalmente integrável ou totalmente caótico e ergódico na superfície de energia. Apesar disso, o caso intermediário e mais geral também pode ser considerado. Começaremos com os casos extremos [13].

Sistemas totalmente integráveis

Consideremos uma família de hamiltonianos integráveis com N graus de liberdade, $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \tau)$, onde $\mathbf{p} = p_1, \dots, p_N$, $\mathbf{q} = q_1, \dots, q_N$ e $\tau = \varepsilon t$ determina a variação temporal lenta do hamiltoniano. *Definimos*:

1. as N variáveis de ação I_i :

$$I_i = \oint_{\gamma_i} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}$$

onde γ_i , $i = 1, \dots, N$ são as curvas que formam a base do grupo fundamental de toros do sistema.

2. uma função contínua positiva $\rho(\varepsilon)$ satisfazendo a condição $c\sqrt{\varepsilon} \leq \rho(\varepsilon)$, onde c é uma constante.

Para este caso, o Teorema Adiabático garante que na escala $1/\varepsilon$, isto é, $\tau \in [0, 1]$ (ou $t \in [0, T]$, com $T = 1/\varepsilon$), a variação da ação reduzida I_i ($i = 1, \dots, N$) é menor que $\rho(\varepsilon)$ para toda condição inicial não pertencente a um certo conjunto de medida da ordem de $\sqrt{\varepsilon}/\rho(\varepsilon)$. Simbolicamente,

$$\sup_{t \in [0, T]} |I(t) - I(0)| \leq \rho(\varepsilon)$$

Este teorema generalisa o exemplo do pêndulo em uma dimensão. A partir daí pode se pensar de forma mais geral em quantização e na validade das regras de Bohr-Sommerfeld.

Sistemas totalmente ergódicos

O exemplo mais comum de sistema ergódico é um gás confinado num recipiente. Isso sugere um sistema com muitas partículas ($\sim 10^{23}$ partículas). No entanto, devemos ter em mente que um sistema com poucas partículas pode ser caótico e ergódico na superfície de energia. O resultado da invariância adiabática para sistemas ergódicos N -dimensionais teve origem na termodinâmica estatística (com sistemas de muitas partículas). Voltando ao caso do gás num recipiente, consideremos que uma das paredes do recipiente se mova

muito lentamente. Este é um exemplo típico de transformação adiabática em termodinâmica, que pode apresentar problemas do ponto de vista matemático, devido à não diferenciabilidade do potencial de interação de esferas duras.

Consideremos o hamiltoniano $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \tau)$, de um sistema ergódico na superfície de energia para todos os valores do parâmetro $\tau = \varepsilon t$. Então, segundo o Teorema Adiabático para este caso, *o volume limitado pela superfície de energia é um invariante adiabático, e não há outro invariante*. Esse volume, chamado de *invariante adiabático ergódico*, é dado por

$$\Omega(E, t) \equiv \int \cdots \int \Theta[E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \tau)] d^N p d^N q \quad (2.3)$$

onde E denota a energia do sistema e $\Theta(x)$ é a função degrau unitária:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \geq 0 \\ 0 & \text{se } x < 0 \end{cases}$$

Devemos observar que no caso $N = 1$, Ω se reduz à área limitada pela curva $H(p, q; \tau) = E$, ou seja, à ação reduzida. Uma outra observação é que através do invariante adiabático ergódico, dada uma condição inicial no instante $t = 0$ com energia $E(0) = E_0$, a energia em um instante posterior $t \ll T$ pode ser obtida fazendo-se $\Omega(E, t) = \Omega(E_0, 0)$.

Da fórmula de Boltzmann temos que a entropia de um sistema é dada por

$$S = k \log \Omega$$

onde k é a constante de Boltzmann e Ω é o volume limitado pela superfície de energia: o invariante adiabático ergódico. A *conservação da entropia*, resultado conhecido em mecânica estatística, segue da conservação do volume do espaço de fase.

É conveniente citar aqui um exemplo do invariante adiabático ergódico para um sistema de baixa dimensionalidade. O nosso exemplo será o mesmo discutido por Brown *et al.* [14]. Consideremos uma única partícula se movendo em um bilhar quadrado de lado L com paredes impermeáveis e um círculo de raio r , também impermeável, no centro.

A velocidade da partícula é mantida constante em módulo graças às colisões totalmente elásticas e especulares com as paredes. No caso em que L e r são constantes sabe-se que o movimento é caótico e ergódico na superfície de energia. O invariante adiabático ergódico para este sistema é

$$\Omega = 2\pi mEA$$

onde A é a área acessível ($L^2 - \pi r^2$) e E é a energia cinética da partícula:

$$E = \frac{1}{2}mv^2$$

Se L ou r variar lentamente com o tempo, então pode mos calcular a energia após um certo tempo por

$$E(t) = \frac{E(0)A(0)}{A(t)}$$

Mais uma vez podemos aplicar o resultado do invariante adiabático ergódico à termodinâmica: da expressão acima segue a lei de transformação adiabática para um gás ideal, a saber

$$PV^\gamma = \text{const.}$$

onde P é a pressão, V é o volume e $\gamma = \frac{\tilde{N}+2}{\tilde{N}}$ é a constante adiabática, $\tilde{N}$ é o número de graus de liberdade de cada partícula. A pressão a uma temperatura T e uma densidade de partículas n é dada por $P = nkT$ (k é a constante de Boltzmann). Pelo teorema da partição, a energia média de uma partícula de gás é $E = \tilde{N}kT/2$. No nosso exemplo, $\tilde{N} = 2 \Rightarrow \gamma = 2$, $V = A$, $n = 1/A$. Segue: $P = kT/A$, $E = kT$. Entao

$$PV^\gamma = \frac{kT}{A}A^2 = EA = \text{const.}$$

Nos referimos anteriormente aos Teoremas Adiabáticos para sistemas totalmente integráveis e para sistemas ergódicos na superfície de energia usando o adjetivo *precisos*. Vale salientar que dizer que o *teorema* é preciso não significa dizer que a *invariância* é precisa. Pelo contrário: no teorema essa invariância já é colocada de forma aproximada.

Nosso interesse no que segue será investigar o erro na invariância adiabática ergódica, considerando, agora, também os casos intermediários para os quais não há um teorema adiabático geral.

2.2.3 Precisão da Invariância Adiabática e os Casos Intermediários.

Consideremos um hamiltoniano de N graus de liberdade $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \varepsilon t)$, diferenciável em todas as variáveis. Seja $E(t)$ a energia obtida da conservação do invariante adiabático ergódico:

$$\Omega(E(t), t) = \Omega(E(0), 0) \quad (2.4)$$

É evidente que a energia assim obtida tem uma imprecisão decorrente da imprecisão da invariância de Ω . Tomemos um *ensemble* de condições iniciais na superfície de energia determinada por $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}; 0) = E(0)$. Como a energia $E(t)$ acima terá um certo erro, teremos, para uma partícula qualquer do ensemble, $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \varepsilon t) \not\equiv E(t)$. Como foi mostrado em [3, 14], esse erro $\Delta E \equiv H - E$ cresce difusivamente com o tempo

$$\boxed{\langle \Delta E^2 \rangle = 2Dt}, \quad (2.5)$$

com uma constante de difusão D proporcional à integral sobre o tempo da função de correlação da força generalizada $\partial H / \partial t$:

$$D \propto \int_{-\infty}^{\infty} dt C(E, t)$$

onde

$$\begin{aligned} C(E, t) = & \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} \left(\frac{\partial H}{\partial t}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle \right) \times \\ & \times \left(\frac{\partial H}{\partial t}(\mathbf{Q}(t), \mathbf{P}(t)) - \left\langle \frac{\partial H}{\partial t} \right\rangle \right) \delta(H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - E) \end{aligned}$$

Na equação acima, $(\mathbf{Q}(t), \mathbf{P}(t))$ é o ponto do espaço de fases atingido da evolução do hamiltoniano partindo-se do instante t e das coordenadas $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$. Desse modo, $\mathbf{Q}(t) = \mathbf{Q}(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)$ e $\mathbf{P}(t) = \mathbf{P}(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)$.

Esses resultados são válidos para o caso em que o sistema é totalmente ergódico. Porém, se essa condição não for satisfeita, isto é, se ilhas estiverem presentes, não há resultado teórico. Brown *at. al.* [14] calcularam numericamente o desvio do invariante adiabático para o hamiltoniano

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \varepsilon t) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + gx^2 + y^2 + x^2y^2$$

onde $g = g(\varepsilon t)$. Foi observada conservação do invariante adiabático, com um desvio um pouco maior que o de sistemas ergódicos, para o sistema apresentando ilhas pequenas.

2.3 O Teorema Adiabático Quântico

Consideremos agora o hamiltoniano quântico que tenha uma dependência temporal lenta $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}; \varepsilon t)$. Trataremos aqui o tempo como um parâmetro, e usaremos a base instantânea $|\varphi_n(\varepsilon t)\rangle$ definida por:

$$H(\varepsilon t) |\varphi_n(\varepsilon t)\rangle = E_n(\varepsilon t) |\varphi_n(\varepsilon t)\rangle \quad (2.6)$$

com a condição de normalização

$$\langle \varphi_m(\varepsilon t) | \varphi_n(\varepsilon t) \rangle = \delta_{mn} . \quad (2.7)$$

Consideremos o estado

$$|\psi(\varepsilon t)\rangle = \sum_n c_n(\varepsilon t) |\varphi_n(\varepsilon t)\rangle . \quad (2.8)$$

Queremos resolver o problema de valor inicial com a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\varepsilon t)\rangle = H(\varepsilon t) |\psi(\varepsilon t)\rangle \quad (2.9a)$$

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) |\varphi_n(0)\rangle \quad (2.9b)$$

Substituindo (2.8) em (2.9a) e multiplicando por $\langle \varphi_m(\varepsilon t) |$ vem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_m(\varepsilon t) + i\hbar \sum_n c_n(\varepsilon t) \langle \varphi_m(\varepsilon t) | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_n(\varepsilon t)\rangle = c_m(\varepsilon t) E_m(\varepsilon t). \quad (2.10)$$

Podemos calcular $\langle \varphi_m(\varepsilon t) | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_n(\varepsilon t)\rangle$ para $m = n$ derivando $\langle \varphi_m(\varepsilon t) | \varphi_m(\varepsilon t)\rangle$ em relação ao tempo e usando (2.7). Chegamos a que

$$\langle \varphi_m(\varepsilon t) | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_m(\varepsilon t)\rangle = i\alpha(\varepsilon t) \quad (2.11)$$

onde $\alpha(\varepsilon t) \in \mathbf{R}$. Para $n \neq m$ derivando os dois lados de (2.6) em relação ao tempo e multiplicando por $\langle \varphi_m(\varepsilon t) |$ obtemos

$$\langle \varphi_m(\varepsilon t) | \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_n(\varepsilon t)\rangle = \frac{\langle \varphi_m(\varepsilon t) | \frac{\partial H}{\partial t} |\varphi_n(\varepsilon t)\rangle}{E_n(\varepsilon t) - E_m(\varepsilon t)} \quad (2.12)$$

Substituindo (2.11) e (2.12) em (2.10) vem

$$\frac{\partial}{\partial t} c_m(\varepsilon t) + \frac{i}{\hbar} f_m(\varepsilon t) c_m(\varepsilon t) = \sum_{n \neq m} c_n(\varepsilon t) \frac{\langle \varphi_m(\varepsilon t) | \frac{\partial H}{\partial t} |\varphi_n(\varepsilon t)\rangle}{E_n(\varepsilon t) - E_m(\varepsilon t)} \quad (2.13)$$

onde

$$f_m(\varepsilon t) \equiv E_m(\varepsilon t) + \hbar \varepsilon \alpha_m(\varepsilon t) .$$

Definimos:

$$\tilde{c}_m(\varepsilon t) \equiv c_m(\varepsilon t) e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t f_m(\varepsilon t') dt} \quad (2.14a)$$

$$|\tilde{\varphi}_m(\varepsilon t)\rangle \equiv e^{\frac{-i}{\hbar} \int_0^t f_m(\varepsilon t') dt} |\varphi_m(\varepsilon t)\rangle \quad (2.14b)$$

substituindo (2.14a) e (2.14b) em (2.13) vem

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{c}_m(\varepsilon t) = \sum_{n \neq m} \tilde{c}_n(\varepsilon t) \frac{\langle \tilde{\varphi}_m(\varepsilon t) | \frac{\partial H}{\partial t} | \tilde{\varphi}_n(\varepsilon t) \rangle}{E_n(\varepsilon t) - E_m(\varepsilon t)}$$

que tem por solução

$$\tilde{c}_m(\varepsilon t) = c_m(0) + \int_0^t \sum_{n \neq m} \tilde{c}_n(\varepsilon t) \frac{\langle \tilde{\varphi}_m(\varepsilon t) | \frac{\partial H}{\partial t} | \tilde{\varphi}_n(\varepsilon t) \rangle}{E_n(\varepsilon t) - E_m(\varepsilon t)} dt$$

onde usamos o fato de que $\tilde{c}_m(0) = c_m(0)$. Assumindo que

$$\langle \tilde{\varphi}_m(\varepsilon t) | \frac{\partial H}{\partial t} | \tilde{\varphi}_n(\varepsilon t) \rangle = \varepsilon \langle \tilde{\varphi}_m(\varepsilon t) | \frac{\partial H}{\partial \tau} | \tilde{\varphi}_n(\varepsilon t) \rangle \ll E_n(\varepsilon t) - E_m(\varepsilon t)$$

temos que em ordem zero em $\varepsilon \frac{\partial H}{\partial \tau}$ podemos aproximar $\tilde{c}_m(\varepsilon t) \approx c_m(0)$, e em primeira ordem,

$$\tilde{c}_m(\varepsilon t) = c_m(0) + \sum_{n \neq m} \tilde{c}_n(0) \int_0^t \frac{\langle \tilde{\varphi}_m(\varepsilon t) | \frac{\partial H}{\partial t} | \tilde{\varphi}_n(\varepsilon t) \rangle}{E_n(\varepsilon t) - E_m(\varepsilon t)} dt$$

Suponhamos agora que

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_m(0)\rangle$$

(isto é, $c_n(0) = \delta_{nm}$). Então, em ordem zero temos

$$\begin{aligned} |\psi(\varepsilon t)\rangle &= \sum_n c_n(\varepsilon t) |\varphi_n(\varepsilon t)\rangle = \sum_n \tilde{c}_n(\varepsilon t) |\tilde{\varphi}_n(\varepsilon t)\rangle = \sum_n c_n(0) |\tilde{\varphi}_m(\varepsilon t)\rangle \\ &= e^{\frac{-i}{\hbar} \int_0^t f_m(\varepsilon t') dt} |\varphi_m(\varepsilon t)\rangle \end{aligned}$$

Chegamos assim ao resultado desejado: *um autoestado de H no instante $t = 0$ evolui no tempo como um autoestado instantâneo a menos de uma fase, isso é, ele não muda de subspaço. Um sistema inicialmente em um autoestado de H vai permanecer no autoestado que deriva desse continuamente [15, 16, 17].*

Capítulo 3

Os Trabalhos de Wilkinson, Berry, Robbins, Carvalho e Aguiar

3.1 Dissipação por Osciladores Idênticos

Wilkinson [3] estudou a dissipação — definida como conversão irreversível de trabalho em calor — de um sistema de interesse macroscópico com um pequeno número de coordenadas observáveis para um grande número de graus de liberdade microscópicos não observáveis. Um possível modelo para os graus de liberdade microscópicos é um banho de osciladores harmônicos com distribuição contínua de frequências, como estudado por Caldeira e Leggett [1, 2]. Esse modelo é adequado para se tratar o caso em que os graus de liberdade são bósons, como fônons em um sólido. Outro possível modelo para os graus de liberdade microscópicos é um banho de osciladores idênticos e independentes, com dinâmica arbitrária, caso esse estudado por Wilkinson. Esse modelo é ideal para se tratar um gás de férmions com interação fraca confinados em uma barreira de potencial, como elétrons em um metal, segundo o modelo de Sommerfeld.

Embora não consideremos nesta tese o acoplamento a muitos graus de liberdade, o resultado de Wilkinson é de nosso interesse porque se aplica também quando o acoplamento do sistema de interesse é com um sistema com poucos graus de liberdade.

Sejam os graus de liberdade macroscópicos denotados por $\mathbf{X}$, e os microscópicos por $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$. O hamiltoniano do problema tem a forma $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}; \mathbf{X})$, onde a variação de $\mathbf{X}$ é suposta lenta comparada com a escala de tempo característica do movimento individual dos osciladores, isto é, a variação é *adiabática*.

Um exemplo do sistema considerado por Wilkinson é um gás confinado por paredes que se deformam segundo a coordenada $\mathbf{X}$ (que pode ser, por exemplo, a distância entre duas paredes, ou entre alguma parede e um ponto específico, ou um ângulo de deformação, etc). O movimento do gás é suposto balístico (isto é, o livre caminho médio das partículas do gás é maior que as distâncias entre as paredes), o que caracteriza um bilhar. É conhecido o fato de que um bilhar, dependendo do contorno, pode exibir movimento regular ou caótico. O problema proposto foi entender como a parede sujeita a variações altera a propriedade de “banho térmico” do gás.

A dissipação procurada corresponde à componente irreversível da taxa de variação da energia do gás de osciladores microscópicos. O cálculo da taxa de dissipação foi feito através da estimativa da variação da energia das partículas do gás quando o hamiltoniano varia adiabaticamente em $\mathbf{X}$, e são às correções na invariância adiabática em virtude de a taxa de variação de $\mathbf{X}$ ser finita que estão associados os efeitos irreversíveis. Uma vez que temos teoremas adiabáticos diferentes para sistemas clássicos regulares e ergódicos, esses dois casos foram tratados separadamente.

Wilkinson concluiu, em seu trabalho, que a taxa de dissipação é drasticamente reduzida se o movimento dos osciladores microscópicos for regular, em comparação com o caso em que o movimento é caótico. Na verdade, para um gás de férmions integrável, a dissipação é exponencialmente pequena, enquanto que para um gás ergódico, a dissipação depende linearmente de uma função de correlação para $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{X}}(0)$ e $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{X}}(t)$.

3.2 Reação Adiabática Caótica Clássica e “Meio - Clássica”

Berry e Robbins [4] consideraram um sistema leve, rápido, que pode ser clássico ou quântico, e um sistema pesado, lento e clássico. O sistema de interesse, nessa abordagem, que é o lento, é influenciado pelo sistema rápido. Novamente aqui o sistema pesado é lento o suficiente para ser considerado como variando adiabaticamente em relação ao rápido. Na aproximação adiabática (ou de ‘Born-Oppenheimer’) a energia do movimento rápido, calculada para o sistema lento ‘congelado’ age como um potencial no qual o sistema lento evolui. Esse efeito é obtido como uma primeira aproximação (em ordem zero) na velocidade lenta. Na aproximação seguinte, há duas forças adicionais: uma do tipo magnética e a outra é a fricção determinística, foco de atenção aqui, e que foi calculada por Wilkinson no trabalho que discutimos anteriormente. Vale ressaltar que o termo *determinístico* é usado pelos autores para expressar que não é necessário um limite termodinâmico (isto é, o sistema rápido não precisa ser um banho) para que haja esse tipo de fricção, ela surge para sistemas rápidos de baixa dimensionalidade que apresentem movimento caótico.

Para evitar flutuações, o sistema lento está acoplado a um *ensemble* microcanônico de sistemas rápidos, descrito por uma função distribuição no espaço de fase, e não a um único sistema. Quando o sistema rápido é quântico, o sistema lento (clássico) é acoplado a uma matriz densidade representando o rápido. Nesse caso, não foi encontrada dissipação a partir da aproximação feita.

O sistema lento considerado tem três graus de liberdade, descrito pelas coordenadas

$$\mathbf{R} = \{R_i\} = \{X, Y, Z\}.$$

O acoplamento com o sistema rápido se dá através justamente dessas coordenadas $\mathbf{R}(t)$.

A aceleração do sistema lento é dada pela força de reação ao movimento rápido:

$$\dot{\mathbf{V}} = \mathbf{F}$$

onde assumimos massa unitária.

O objetivo do trabalho de Berry e Robbins [4] foi determinar $\mathbf{F}$ em termos da média sobre o movimento rápido incluindo termos lineares na velocidade $\mathbf{V}$.

Conforme já foi sugerido acima, os autores consideraram dois casos, sempre com o sistema lento clássico e com três graus de liberdade. No primeiro caso o sistema rápido foi tomado como sendo clássico e caótico, e no segundo, quântico. Esse segundo caso foi por eles chamado de *meio clássico* (“*half-classical*”), uma vez que o termo semiclássico é inadequado à situação tratada.

3.2.1 Sistema rápido clássico

Tomemos um sistema rápido limitado com d graus de liberdade:

$$z = \{\mathbf{q}, \mathbf{p}\} = \{q_1, \dots, q_d, p_1, \dots, p_d\}.$$

O *ensemble* microcanônico de trajetórias é representado pela função distribuição

$$\rho(z, t)$$

normalizada

$$\int dz \rho = 1. \tag{3.1}$$

Seja h o hamiltoniano dependente do tempo que gera o movimento rápido. Esse hamiltoniano é governado parametricamente pelas coordenadas $\mathbf{R}$, que mudam lentamente com o tempo: $h = h(z, \mathbf{R}(t))$. A evolução do *ensemble* descrito por ρ é dada pelo

colchete de Poisson

$$\varepsilon \dot{\rho}(z, t) = \{h(z, \mathbf{R}(t)), \rho(z, t)\} \quad (3.2)$$

onde ε é um parâmetro adiabático, cuja pequenez garante a lentidão do movimento de z em relação a $\mathbf{R}$. Por exemplo, podemos definir

$$\varepsilon^2 = \frac{\text{massa do sistema rápido (leve)}}{\text{massa do sistema lento (pesado)}}.$$

A força $\mathbf{F}$ é definida a partir da média sobre o espaço de fase do sistema rápido

$$\mathbf{F} = - \int dz \rho \nabla h \quad (3.3)$$

onde o gradiente opera sobre as coordenadas $\mathbf{R}$.

Para determinar $\mathbf{F}$ até primeira ordem em ε é necessário expandir ρ :

$$\rho = \sum_{r=0}^{\infty} \varepsilon^r \rho_r \quad (3.4)$$

e de (3.2) pode-se facilmente obter que

$$\{h, \rho_0\} = 0, \quad \{h, \rho_r\} = \dot{\rho}_{r-1} \quad (r > 0). \quad (3.5)$$

Isso significa que ρ_0 é constante na superfície de energia do sistema rápido para $\mathbf{R}$ *congelado*. Os autores escolheram o *ensemble* microcanônico normalizado:

$$\rho_0(z, t) = \frac{\delta(E(\mathbf{R}) - h(z, \mathbf{R}))}{\partial_E \mu(E(\mathbf{R}), \mathbf{R})} \quad (3.6)$$

onde μ é o volume compreendido pela superfície de energia

$$\Omega = \int dz \Theta(E - h(z, \mathbf{R}))$$

que é o invariante adiabático.

Mais uma vez tem papel importante a diferença entre a energia calculada a partir do invariante adiabático e a energia exata:

$$\Delta E = h(z, \mathbf{R}) - E(\mathbf{R}) \equiv \tilde{h}. \quad (3.7)$$

Da adiabaticidade vem que

$$\left\langle \nabla \tilde{h} \right\rangle_{E(\mathbf{R})} = 0 \quad (3.8)$$

onde os colchetes representam a média no *ensemble*:

$$\langle x \rangle_{E(\mathbf{R})} \equiv \int dz \rho_0(z, t) x = \frac{1}{\partial_E \mu} \int dz \delta(E - h) x.$$

Podemos verificar (3.8) partindo da adiabaticidade ($\Omega = \text{const.}$), de onde vem

$$\nabla \Omega = 0,$$

ou seja,

$$\int dz \nabla \Theta (E(\mathbf{R}) - h(z, \mathbf{R})) = 0. \quad (3.9)$$

Mas

$$\nabla \Theta = \frac{\partial \Theta}{\partial E} \nabla E + \frac{\partial \Theta}{\partial h} \nabla h$$

e uma vez que $\frac{\partial \Theta}{\partial h} = -\frac{\partial \Theta}{\partial E}$ e $\frac{\partial \Theta}{\partial E} = \delta(E - h)$ vem

$$\nabla \Theta = \delta(E - h) \nabla (E - h). \quad (3.10)$$

Substituindo (3.10) em (3.9) vem

$$\int dz \delta(E - h) [\nabla (E - h)] = 0 \implies \langle \nabla (h(z, \mathbf{R}) - E(\mathbf{R})) \rangle = 0$$

e como

$$\left\langle \nabla \tilde{h} \right\rangle_{E(\mathbf{R})} = \langle \nabla (h(z, \mathbf{R}) - E(\mathbf{R})) \rangle$$

chegamos a (3.8).

De (3.7) vem que $\nabla h = \nabla \tilde{h} + \nabla E$. Reescrevendo a força (3.3) usando (3.1) e (3.4) vem

$$\mathbf{F} = -\nabla E - \int dz (\rho_0 + \varepsilon \rho_1 + O(\varepsilon^2)) \nabla \tilde{h}$$

Usando (3.8) vem

$$\mathbf{F} = -\nabla E + \varepsilon \mathbf{F}_1 + O(\varepsilon^2) \quad (3.11)$$

onde

$$\mathbf{F}_1 = - \int dz \rho_1 \nabla \tilde{h}$$

O termo $-\nabla E$ é a força de Born-Oppenheimer e $\varepsilon \mathbf{F}_1$ é a força de interesse de primeira ordem. Para calculá-la, é necessário conhecer a expressão de ρ_1 , obtida por Berry e Robbins:

$$\rho_1(z, t) = - \int_{-\infty}^0 d\tau \partial_t \rho_0 [z_\tau(z, \mathbf{R}(t)), t] + f_1 [h(z, \mathbf{R}(t)), t] \quad (3.12)$$

onde $z_\tau(z, \mathbf{R}(t))$ é a trajetória gerada pelo hamiltoniano h no tempo τ , com as condições iniciais z , sob a dinâmica *congelada* do sistema lento, e f_1 é uma solução da equação homogênea $\{h, \rho_1\} = 0$, que é uma correção da força de Born-Oppenheimer, independente de $\mathbf{V}$, e por isso será desconsiderada. Substituindo a expressão de ρ_0 , equação (3.6), em (3.12), vem

$$\rho_1(z, t) = - \frac{1}{\partial_E \Omega} \int_{-\infty}^0 d\tau \partial_t \delta (E(z_\tau(z, \mathbf{R}), t) - h(z_\tau(z, \mathbf{R}), t))$$

Mas

$$\partial_t \delta(E - h) = \dot{\mathbf{R}} \partial_{\mathbf{R}} \delta(E - h) = -\mathbf{V} \cdot \nabla (E - h) \partial_E \delta(E - h) +$$

+termo proporcional a $\delta(E - h)$

e portanto

$$\rho_1 \approx \mathbf{V} \cdot \frac{1}{\partial_E \mu} \int_{-\infty}^0 d\tau [\partial_E \delta(E - h)] \left(\nabla \tilde{h} \right)_\tau$$

onde

$$\left(\nabla \tilde{h} \right)_\tau = \nabla \tilde{h}(z_\tau(z, \mathbf{R}), \mathbf{R}).$$

Podemos agora escrever $\mathbf{F}_1$, invertendo o sinal de τ :

$$\mathbf{F}_1 = -\mathbf{V} \cdot \frac{1}{\partial_E \mu} \partial_E \left[\partial_E \mu \int_0^\infty d\tau \left\langle \left(\nabla \tilde{h} \right)_\tau \nabla \tilde{h} \right\rangle_E \right] = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{V}$$

com

$$K_{ij} \equiv \frac{1}{\partial_E \mu} \partial_E \left[\partial_E \mu \int_0^\infty d\tau C_{ij}(\tau) \right]$$

e

$$C_{ij}(\tau) = \left\langle (\partial_i \tilde{h})_\tau \partial_j \tilde{h} \right\rangle_E$$

A função de correlação $C_{ij}(\tau)$ é análoga à discutida no trabalho de Wilkinson. Para sistemas caótico, $C_{ij}(\tau) \rightarrow 0$ para $\tau \rightarrow \infty$, de modo que a integral em K_{ij} converge.

As funções K_{ij} podem ser separadas em suas partes simétrica e antissimétrica

$$\begin{aligned} K_{ij}^{(s)} &= \frac{1}{2}(K_{ij} + K_{ji}) \\ K_{ij}^{(a)} &= \frac{1}{2}(K_{ij} - K_{ji}) \end{aligned}$$

A força tipo magnética é obtida da parte antissimétrica:

$$\mathbf{F}_1^{(a)} = \mathbf{V} \times \mathbf{B}(\mathbf{R})$$

com

$$\mathbf{B}(\mathbf{R}) = \frac{1}{2\partial_E \mu} \partial_E \left[\partial_E \mu \int_0^\infty d\tau \left\langle \left(\nabla \tilde{h} \right)_\tau \times \nabla \tilde{h} \right\rangle_E \right].$$

A parte simétrica dá origem à fricção determinística, transferência irreversível de energia do sistema lento para o rápido, caótico. Em primeira ordem em ε a energia dissipada é

$$\varepsilon \mathbf{V} \cdot \mathbf{F}_1 = -\varepsilon V_i V_j K_{ij}$$

Os autores mostram que essa energia cumpre as condições para representar de fato dissipação. Dentre essas condições, destacamos que K_{ij} é positivo.

3.2.2 Sistema rápido quântico

Nesse caso, o sistema lento ainda é clássico, mas está acoplado a um sistema rápido quântico, descrito por uma matriz de densidade $\rho(t)$ e governado pelo hamiltoniano $h(\mathbf{R})$. Mais uma vez, $\mathbf{R}$ varia lentamente com o tempo.

Analogamente ao caso tratado anteriormente, a evolução temporal de ρ é dada pelo comutador

$$i\hbar \varepsilon \dot{\rho}(z, t) = [h(\mathbf{R}(t)), \rho(t)] ,$$

ρ é normalizado,

$$Tr \rho = 1 ,$$

e ε é o parâmetro adiabático. Analogamente a (3.3) temos

$$\mathbf{F} = -Tr \rho \nabla h \tag{3.13}$$

Mais uma vez como no caso clássico, ρ é expandido na série de potências (3.4) e se obtém, como em (3.5),

$$[h, \rho_0] = 0, \quad [h, \rho_r] = i\hbar \dot{\rho}_{r-1} \quad (r > 0). \tag{3.14}$$

Desse modo vemos que ρ_0 comuta com o hamiltoniano $h(\mathbf{R})$ congelado. Para cada valor do parâmetro $\mathbf{R}$, que varia lentamente, temos autoestados e autoenergias de $h(\mathbf{R})$, que são funções de $\mathbf{R}$, chamados de autoestados e níveis de energia adiabáticos:

$$h(\mathbf{R}) |m(\mathbf{R})\rangle = E_m(\mathbf{R}) |m(\mathbf{R})\rangle$$

Pode-se escolher ρ_0 como um desses autoestados

$$\rho_0(t) = |n(\mathbf{R})\rangle \langle n(\mathbf{R})| \quad (3.15)$$

o que é o análogo da distribuição microcanônica.

Usando (3.4), (3.13) e (3.15), podemos escrever a força de forma análoga a (3.11)

$$\mathbf{F} = -\nabla E_n(\mathbf{R}) + \varepsilon \mathbf{F}_1 + O(\varepsilon^2)$$

onde

$$\mathbf{F}_1 \equiv -Tr \rho_1 \nabla h = - \sum_{k,l} \langle k | \rho_1 | l \rangle \langle l | \nabla h | k \rangle$$

O termo $\nabla E_n (= \langle n | \nabla h | n \rangle)$ é a força de Born-Oppenheimer e o termo seguinte é a força em primeira ordem. Conforme mostram os autores,

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{V} \times \mathbf{B}(\mathbf{R})$$

onde

$$\mathbf{B}(\mathbf{R}) \equiv i\hbar \sum_k \langle \nabla n | k \rangle \times \langle k | \nabla n \rangle$$

Desse modo chegou-se ao resultado que quando o sistema caótico é quântico, a força em primeira ordem que age sobre o sistema lento clássico é inteiramente do tipo magnética, antissimétrica. Nesse caso, portanto, não se obtém fricção em primeira ordem.

No nosso trabalho, investigamos exatamente esse aspecto do problema, procurando-

do efeitos dissipativos (e eventualmente outros efeitos) devido à não-adiabaticidade do sistema de interesse em relação ao seu 'banho' caótico.

3.3 Caos Clássico Como Um Ambiente Para a Dissipação

Como já mencionamos na Introdução, o trabalho de T. O. de Carvalho e M. A. M de Aguiar [6] consistiu em examinar a dissipação entre dois sistemas clássicos acoplados. Um dos sistemas, lento e pesado, foi um oscilador quártico. O segundo, rápido, leve e caótico, foi o Nelson. Como já observamos, a partir de um certo valor da energia (aproximadamente 0.3) o Nelson apresenta comportamento fortemente caótico. Foi essa propriedade que permitiu aos autores, e permite a nós, usá-lo como reservatório caótico. Além disso, essa propriedade torna possível a comparação do comportamento do sistema lento e da troca de energia para o Nelson caótico com o caso em que ele é regular.

Carvalho e Aguiar consideraram o sistema isolado, governado pelo hamiltoniano

$$H = H_N + H_I + H_z$$

onde H_N é o hamiltoniano do Nelson,

$$H_N(x, y, p_x, p_y) = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 + \frac{\mu}{2}x^2,$$

H_I é o hamiltoniano de interação,

$$H_I(x, z) = \gamma x z ,$$

e H_z é o oscilador quártico,

$$H_z(z, p_z) = \frac{p_z^2}{2M_z} + \frac{\lambda z^2}{2} + \beta z^4$$

A condição de a dinâmica de z ser *lenta* é satisfeita para $\beta/M_z \ll 1$ se $\lambda = 0$, ou por $\lambda/M_z \ll 1$ se $\beta \gtrsim 0$. Assim sendo, a variável z pode ser encarada como um parâmetro adiabático para a função hamiltoniana $h(z) = H_N + H_I$.

Primeiramente os autores fizeram um cálculo numérico para determinar a força de reação produzida pelo sistema rápido (caótico) no lento. Seguindo a metodologia de Berry e Robbins que expusemos anteriormente, ao invés de analisar a variação de energia durante a evolução a partir de um único ponto no espaço de fase $z - p_z$, os autores trabalharam com a evolução temporal de um *ensemble* microcanônico de pontos. A distribuição microcanônica é dada por

$$\rho(z, p_z) = \frac{\delta(E - H)}{\Sigma(E, z)}$$

onde

$$\begin{aligned}\Sigma(E, z) &= \frac{\partial \Omega(E, z)}{\partial E}, \\ \Omega(E, z) &= \int \Theta(E - H) dx dy dp_x dp_y.\end{aligned}$$

O valor de Ω , que é o invariante adiabático, pode ser facilmente calculado para o Nelson:

$$\Omega = \pi^2 \sqrt{\frac{2}{\mu}} \left[E - H_z + \frac{\gamma^2 z^2}{2\mu} \right]^2$$

Impondo a condição $\Omega = \text{const}$ pode-se derivar a aproximação adiabática para a energia do sistema lento durante a evolução do sistema completo:

$$H_z - \frac{\gamma^2 z^2}{2\mu} = \text{const.} \quad (3.16)$$

(observemos que como o sistema total está isolado, $E = \text{const.}$). O termo $-\gamma^2 z^2/2\mu$ é o potencial renormalizador de Born-Oppenheimer, V_r , resultante do acoplamento. Deve-se ressaltar que esse termo independe da dinâmica do sistema rápido.

Para verificar a existência de dissipação, os autores fizeram os gráficos da energia do oscilador e da energia renormalizada, E_{z_r} , em função do tempo e também calcula a evolução do sistema no espaço de fases. A expressão da energia renormalizada do oscilador é obtida a partir de (3.16):

$$E_{z_r} = E_z - \frac{\gamma^2 z^2}{2\mu}$$

Os resultados a que eles chegaram encontram-se nas figuras 3.1 e 3.2 abaixo. Os parâmetros usados foram $\gamma = 6 \times 10^{-3}$, $\lambda = 0$, $\beta = 4 \times 10^{-4}$ e $M_z = 100$. Na primeira figura, a energia total é $E=0.04$, de modo que o potencial Nelson está em regime regular, e na segunda $E=0.38$, e o Nelson apresenta comportamento caótico.

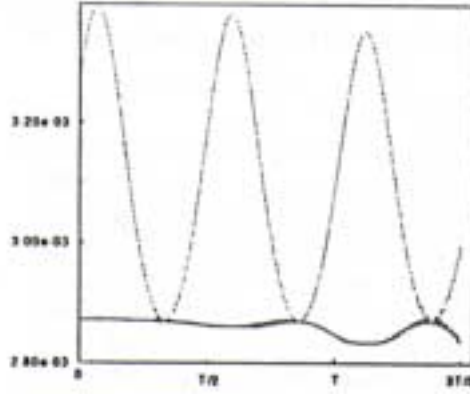


Fig 3.1: A energia E_z do sistema lento (curva oscilante) e a energia renormalizada (curva quase constante) em função do tempo, para o Nelson em regime regular.

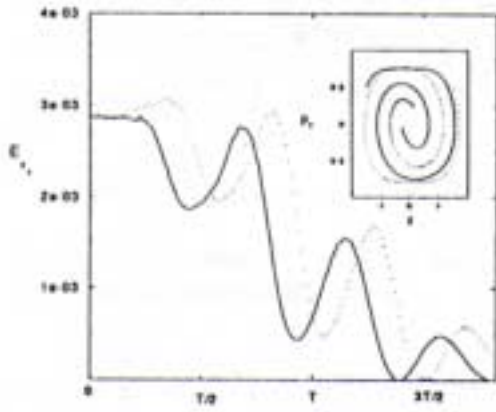


Fig 3.2: Energia renormalizada em função do tempo para o Nelson em regime caótico. A evolução no espaço de fases está mostrada no detalhe.

Observa-se das figuras acima que no caso em que o Nelson está na dinâmica regular a subtração do potencial renormalizador corrige as oscilações na energia do sistema lento.

Desse modo, são eliminadas as oscilações na energia do sistema lento decorrentes da troca reversível de energia. Nesse caso, a energia renormalizada permanece praticamente constante. Por outro lado, quando o Nelson está em regime caótico, a amplitude das oscilações na energia do sistema lento é maior que o potencial renormalizador de Born-Oppenheimer. Obtêm-se, nesse caso, oscilações na energia renormalizada, bem como uma tendência de queda nessa energia, o que caracteriza a dissipação. Ainda na figura 3.2, no interior dela é apresentado o espaço de fases com a evolução temporal do sistema lento. Também nesse gráfico fica evidente a perda de energia do sistema lento.

A idéia do nosso trabalho é procurar os mesmos efeitos, porém do ponto de vista quântico.

Capítulo 4

O Potencial Nelson

4.1 A Forma do Potencial

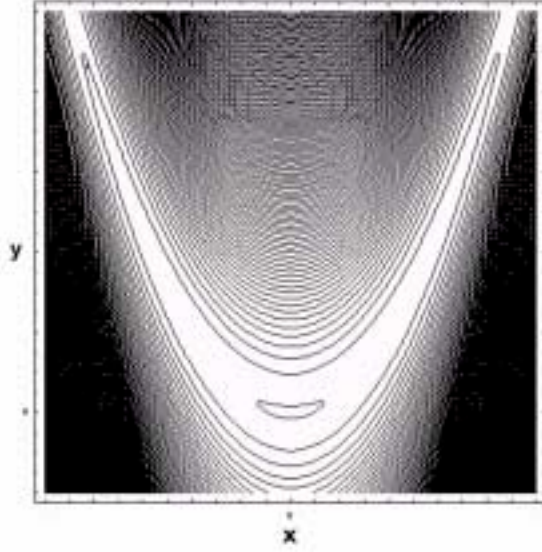
Neste capítulo, faremos uma breve exposição da forma e das propriedades do *Potencial Nelson*, que usamos como o potencial caótico rápido no nosso trabalho.

O *Potencial Nelson*, ‘criado’ e extensamente estudado por Baranger e Davis [18], tem a forma:

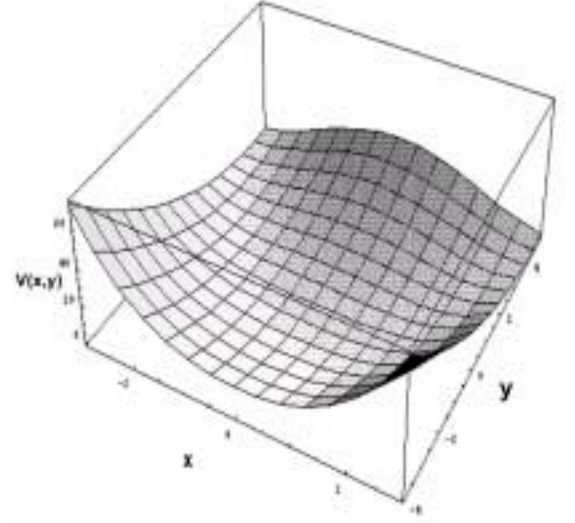
$$V(x, y) = \frac{\mu}{2}x^2 + \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 \quad (4.1)$$

Ele tem um comportamento que podemos considerar como genérico, uma vez que apresenta dinâmica *regular* para energias menores que aproximadamente 0.05, fortemente *caótica* (no sentido que seções de Poicaré apresentam ilhas muito pequenas) para energias maiores que aproximadamente 0.3 e *mista* para energias intermediárias. As curvas equipotenciais do Nelson são mostradas na figura 4.1a. A simetria em relação ao eixo y é uma característica importante e valiosa quando se faz a diagonalização da matriz hamiltoniana. Como descrito por Baranger e Davis, *o Potencial tem a forma de um vale cercado por montanhas*. Isso pode ser visto através da figura 4.1b e notando-se que as

curvas externas, na fig 4.1a, são as de maior energia.



(a)



(b)

Fig 4.1: (a) Curvas equipotenciais e (b) gráfico 3D do potencial Nelson.

O hamiltoniano Nelson é escrito da forma

$$H_N = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{\mu}{2}x^2 + \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 \quad (4.2)$$

4.2 Densidade e Número de Níveis

Antes de qualquer cálculo numérico para a obtenção do espectro, devemos obter a expressão para a densidade média de níveis de energia do Nelson, bem como o número médio de níveis com energia menor que um certo valor E . A densidade e o número de níveis serão úteis para testar a convergência do programa, ou seja, qual o máximo valor da energia no qual se pode confiar. Esse procedimento será ilustrado nas próximas seções. Além disso, o número de níveis do hamiltoniano Nelson será importante na escolha dos parâmetros, de forma a se ter ou não um valor de energia para o qual a dinâmica seja caótica.

Seja $N(E)$ o número de níveis quânticos com energia menor ou igual a E :

$$N(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta(E - E_n)$$

onde Θ é a função degrau. O limite clássico de N é dado por

$$\tilde{N}(E) = \frac{1}{h^2} \int \cdots \int_{\frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + V_N(x,y) \leq E} dx dy dp_x dp_y \quad (4.3)$$

onde

$$V_N(x, y) = \frac{\mu}{2} x^2 + \left(y - \frac{x^2}{2} \right)^2$$

A integral em (4.3) pode ser feita separadamente para os momenta: é o volume da circunferência de raio $\sqrt{2(E - V)}$ e desse modo temos

$$\tilde{N}(E) = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \iint_{V_N(x,y) \leq E} (E - V) dx dy \quad (4.4)$$

A densidade de níveis é dada por:

$$\rho(E) = \frac{\partial N(E)}{\partial E} = \sum_{n=0}^{\infty} \delta(E - E_n)$$

onde δ é a função Delta de Dirac. O limite clássico da densidade de níveis é obtido por

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{\partial \tilde{N}(E)}{\partial E} = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \iint_{V_N(x,y) \leq E} dx dy \quad (4.5)$$

Uma mudança de variáveis se faz necessária para calcular a integral dupla sobre x e y .

Sejam

$$X = \sqrt{\frac{\mu}{2}} x$$

$$Y = y - \frac{x^2}{2}$$

O Jacobiano dessa transformação vale $\sqrt{\mu/2}$ e (4.5) fica

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \sqrt{\frac{2}{\mu}} \iint_{X^2+Y^2 \leq E} dXdY$$

novamente a integral é a área do círculo de raio $\sqrt{E}$ e o resultado final é

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{E}{\sqrt{2\mu}\hbar^2} \quad (4.6)$$

Finalmente, integrando essa expressão obtemos o número de níveis:

$$\tilde{N}(E) = \frac{E^2}{2\sqrt{2\mu}\hbar^2} \quad (4.7)$$

4.3 Diagonalização do Hamiltoniano Nelson

4.3.1 Os elementos de matriz

Para a diagonalização do Nelson devemos escolher uma base conveniente. A forma polinomial do hamiltoniano sugere que se utilize a base do oscilador harmônico [19], pois o hamiltoniano pode ser trabalhado nessa base com facilidade usando-se os operadores de criação e destruição. Além disso a base do oscilador também apresenta a vantagem de ser discreta. É conveniente, também, uma mudança de coordenadas que leva em conta a dependência de H com $(y - x^2/2)$, simplificando os cálculos [20, 21].

Na forma cartesiana temos

$$p_k = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x_k},$$

onde $k=1,2$ para x e y , respectivamente, e o hamiltoniano (4.2) fica

$$H_N = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \left(y - \frac{x^2}{2} \right)^2 + \frac{\mu}{2} x^2$$

Sejam as novas coordenadas (operadores, na verdade):

$$\begin{aligned} Q_1 &= x \\ Q_2 &= y - \frac{x^2}{2} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Calculando $\partial/\partial x_k$ nessas coordenadas temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2}{\partial Q_1^2} + Q_1^2 \frac{\partial^2}{\partial Q_2^2} - 2Q_1 \frac{\partial^2}{\partial Q_1 \partial Q_2} - \frac{\partial}{\partial Q_2} \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \frac{\partial^2}{\partial Q_2^2} \end{aligned} \quad (4.9)$$

e o hamiltoniano pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \hat{H}_N &= \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial Q_1^2} + (Q_1^2 + 1) \frac{\partial^2}{\partial Q_2^2} - 2Q_1 \frac{\partial^2}{\partial Q_1 \partial Q_2} - \frac{\partial}{\partial Q_2} \right] + \\ &\quad \frac{\mu}{2} Q_1^2 + Q_2^2 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Definindo os operadores momentum

$$\hat{P}_k = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial Q_k}$$

e substituindo em (4.10) vem

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2} + \left(\hat{Q}_1^2 + 1 \right) \frac{\hat{P}_2^2}{2} - \hat{Q}_1 \hat{P}_1 \hat{P}_2 + \frac{i\hbar}{2} \hat{P}_2 + \frac{\mu}{2} \hat{Q}_1^2 + \hat{Q}_2^2 \quad (4.11)$$

Podemos escrever $\hat{P}_k$ e $\hat{Q}_k$ em termo dos operadores de criação e destruição, $\hat{a}^\dagger$ e $\hat{a}$, respectivamente:

$$\begin{aligned} \hat{P}_k &= \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}} i (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \\ \hat{Q}_k &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \end{aligned} \quad (4.12)$$

onde os ω_k serão especificados adiante. Dessa forma não é difícil calcular os elementos de matriz do hamiltoniano. Tomaremos como base os estados $|n_1 n_2\rangle \equiv |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle$, onde

os $|n_k\rangle$ são auto-estados do oscilador

$$\hat{H}_k = \frac{\hat{P}_k^2}{2} + \frac{\omega_k^2 \hat{Q}_k^2}{2}$$

Primeiramente, calculemos a contribuição de cada termo do hamiltoniano para os elementos de matriz nessa base:

$$\langle n_1 n_2 | \hat{P}_k | n'_1 n'_2 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar \omega_k}{2}} i \left(\sqrt{n_k} \langle n_k | n_k - 1 \rangle - \sqrt{n_k + 1} \langle n_k | n_k + 1 \rangle \right)$$

$$\langle n_1 n_2 | \hat{Q}_k | n'_1 n'_2 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \left(\sqrt{n_k} \langle n_k | n_k - 1 \rangle + \sqrt{n_k + 1} \langle n_k | n_k + 1 \rangle \right)$$

$$\begin{aligned} \langle n_1 n_2 | \hat{P}_k^2 | n'_1 n'_2 \rangle = & -\frac{\hbar \omega_k}{2} \left[\sqrt{n_k(n_k - 1)} \langle n_k | n_k - 2 \rangle + \right. \\ & + \sqrt{(n_k + 1)(n_k + 2)} \langle n_k | n_k + 2 \rangle - \\ & \left. - (2n_k + 1) \langle n_k | n_k \rangle \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n_1 n_2 | \hat{Q}_k^2 | n'_1 n'_2 \rangle = & \frac{\hbar}{2\omega_k} \left[\sqrt{n_k(n_k - 1)} \langle n_k | n_k - 2 \rangle + \right. \\ & + \sqrt{(n_k + 1)(n_k + 2)} \langle n_k | n_k + 2 \rangle + \\ & \left. + (2n_k + 1) \langle n_k | n_k \rangle \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n_1 n_2 | \hat{Q}_k \hat{P}_k | n'_1 n'_2 \rangle = & \frac{\hbar}{2} i \left[\sqrt{n_k(n_k - 1)} \langle n_k | n_k - 2 \rangle - \right. \\ & - \sqrt{(n_k + 1)(n_k + 2)} \langle n_k | n_k + 2 \rangle + \\ & \left. + \langle n_k | n_k \rangle \right] \end{aligned}$$

Os elementos de matriz não nulos são os enumerados abaixo e seus respectivos complexo-conjugados:

$$\langle n_1 n_2 | \hat{H} | n_1 n_2 \rangle = \left[\frac{\hbar}{4\omega_1} (\mu + \omega_1^2) (2n_1 + 1) + \frac{\hbar}{4\omega_2} (2 + \omega_2^2) (2n_2 + 1) + \frac{\hbar}{4\omega_1} \frac{\hbar\omega_2}{2} (2n_1 + 1) (2n_2 + 1) \right]$$

$$\langle n_1 n_2 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 \rangle = \frac{\left[\frac{\hbar}{4\omega_1} (\mu - \omega_1^2) + \frac{\hbar}{4\omega_1} \frac{\hbar\omega_2}{2} (2n_2 + 1) \right]}{\sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)}} \times$$

$$\langle n_1 n_2 | \hat{H} | n_1 n_2 + 2 \rangle = \frac{\left[\frac{\hbar}{4\omega_2} (2 - \omega_2^2) - \frac{\hbar}{4\omega_1} \frac{\hbar\omega_2}{2} (2n_1 + 1) \right]}{\sqrt{(n_2 + 1)(n_2 + 2)}} \times$$

$$\langle n_1 n_2 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 + 2 \rangle = \frac{-\frac{\hbar}{4\omega_1} \frac{\hbar\omega_2}{2} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)}}{\sqrt{(n_2 + 1)(n_2 + 2)}} \times$$

$$\langle n_1 n_2 + 2 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 \rangle = \frac{-\frac{\hbar}{4\omega_1} \frac{\hbar\omega_2}{2} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)}}{\sqrt{n_2(n_2 - 1)}} \times$$

$$\langle n_1 n_2 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 + 1 \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\hbar\omega_2}{2}} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \sqrt{n_2 + 1}$$

$$\langle n_1 n_2 + 1 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\hbar\omega_2}{2}} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \sqrt{n_2}$$

Não há restrições sobre os valores de ω_1 e ω_2 . Escolhemos, por conveniência, $\omega_1 = \sqrt{\mu}$ e $\omega_2 = \sqrt{2}$. Usando esses valores, os elementos de matriz ficam:

$$\langle n_1 n_2 | \hat{H} | n_1 n_2 \rangle = \left[\hbar \sqrt{\mu} \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar \sqrt{2} \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{8} \sqrt{\frac{2}{\mu}} (2n_1 + 1) (2n_2 + 1) \right]$$

$$\langle n_1 n_2 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 \rangle = \frac{\hbar^2}{8} \sqrt{\frac{2}{\mu}} (2n_2 + 1) \times \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)}$$

$$\langle n_1 n_2 | \hat{H} | n_1 n_2 + 2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{8} \sqrt{\frac{2}{\mu}} (2n_1 + 1) \times \sqrt{(n_2 + 1)(n_2 + 2)}$$

$$\langle n_1 n_2 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 + 2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{8} \sqrt{\frac{2}{\mu}} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \times \sqrt{(n_2 + 1)(n_2 + 2)}$$

$$\langle n_1 n_2 + 2 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{8} \sqrt{\frac{2}{\mu}} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \times \sqrt{n_2(n_2 - 1)}$$

$$\langle n_1 n_2 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 + 1 \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{2}}} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \sqrt{n_2 + 1}$$

$$\langle n_1 n_2 + 1 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{2}}} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \sqrt{n_2}$$

4.3.2 O cálculo numérico

A diagonalização deve ser feita numericamente, usando a base do oscilador harmônico truncada e os elementos de matriz acima. Como já mencionamos, a convergência do programa pode ser testada através da comparação entre a densidade ou o número de níveis calculados na seção anterior e os obtidos numericamente usando as energias encontradas na diagonalização. Sejam E_n essas energias. A densidade de níveis é dada por

$$\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

Essa expressão pode ser suavizada substituindo as funções delta por Gaussianas com largura ϵ :

$$\rho_\epsilon(E) = \sum_n \frac{1}{\epsilon\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(E-E_n)^2}{2\epsilon^2}}$$

A suavização elimina flutuações e esperamos que para ϵ suficientemente grande, $\rho_\epsilon(E)$ tenda ao limite clássico $\tilde{\rho}(E)$. Usamos $\epsilon \sim 5 \times [\text{espaçamento médio local dos níveis}]$, ou seja

$$\epsilon = \epsilon(E) \sim \frac{5}{\tilde{\rho}(E)}$$

onde $\tilde{\rho}(E)$ é a densidade média obtida na seção anterior. Fazendo o gráfico de $\tilde{\rho}(E)$ e $\rho_\epsilon(E)$ versus E podemos ver até que valor da energia existe concordância. A partir desse ponto as energias fornecidas pelo programa devem ser desprezadas. O teste usando o número de níveis, por nós preferido, consiste, simplesmente, em colocar num mesmo sistema de eixos n vs E o número de níveis $\tilde{N}$ calculado na seção anterior em função da energia e o índice das energias obtidas numericamente em função dessas energias, devidamente ordenadas em ordem crescente.

Outro teste que pode ser feito é variar o tamanho da base e comparar até que nível as energias obtidas concordam. No nosso caso, esse teste confirmou o anterior.

Um aspecto de importância para o cálculo numérico é a simetria na coordenada x . Com essa simetria a dimensão da matriz a ser diagonalizada pode ser dividida pela metade, tomando-se os estados pares e ímpares separadamente. Isso possibilita a otimização do programa e, conseqüentemente, o aumento da matriz.

A linguagem utilizada foi *Fortran 77*. A rotina usada para a diagonalização foi EIGRS do pacote IMSL.

4.4 Resultados Numéricos

Calculamos as autoenergias e autoestados do Nelson para $\mu = 0.1$ e diferentes valores de $\hbar$. Observamos que a alteração do valor de $\hbar$ é equivalente a se ajustar a massa do Nelson

para um $\hbar$ fixo. Por conveniência, deixamos a massa unitária e variamos $\hbar$. Abaixo, nas tabelas 4.1 a 4.3, estão os valores das autoenergias até o 60º nível e na figura 4.2 estão os gráficos do espectro do Nelson para os mesmos valores de $\hbar$. Para esse cálculo numérico foram usadas matrizes quadradas de $N = 2176$, devidamente ordenadas de forma que julgamos conveniente e que será mencionada nos próximos capítulos, e montada com $n_x \sim 3n_y$, onde $n_x \equiv n_{1_{\max}}$ e $n_y \equiv n_{2_{\max}}$. Essa proporção entre as bases para x e y foi utilizada por apresentar uma melhor convergência.

Tab 4.1: Valores dos níveis de energia do Nelson para $\hbar = 0.01$

0	0,00869	10	0,03024	20	0,04293	30	0,05215	40	0,06041	50	0,06706
1	0,01193	11	0,03314	21	0,04442	31	0,05265	41	0,06126	51	0,06815
2	0,0151	12	0,03323	22	0,04465	32	0,05503	42	0,06186	52	0,06835
3	0,01822	13	0,03601	23	0,04606	33	0,05515	43	0,06302	53	0,06992
4	0,02129	14	0,03652	24	0,04717	34	0,05545	44	0,06324	54	0,07001
5	0,02296	15	0,03724	25	0,04823	35	0,05555	45	0,06417	55	0,07066
6	0,02432	16	0,03884	26	0,04914	36	0,05776	46	0,06512	56	0,07069
7	0,02646	17	0,03975	27	0,04991	37	0,05834	47	0,0656	57	0,0715
8	0,0273	18	0,04099	28	0,05149	38	0,05853	48	0,06578	58	0,07278
9	0,02988	19	0,04165	29	0,05175	39	0,05944	49	0,06696	59	0,07321

Tab 4.2: Valores dos níveis de energia do Nelson para $\hbar = 0.025$

0	0,02186	10	0,07706	20	0,10664	30	0,13082	40	0,15206	50	0,16797
1	0,03021	11	0,08119	21	0,11079	31	0,13350	41	0,15318	51	0,16962
2	0,03819	12	0,08584	22	0,11281	32	0,13551	42	0,15520	52	0,17141
3	0,04588	13	0,08787	23	0,11601	33	0,13674	43	0,15662	53	0,17482
4	0,05331	14	0,09360	24	0,11856	34	0,14059	44	0,15850	54	0,17506
5	0,05800	15	0,09416	25	0,11888	35	0,14253	45	0,16069	55	0,17694
6	0,06053	16	0,09508	26	0,12488	36	0,14278	46	0,16345	56	0,17931
7	0,06757	17	0,10035	27	0,12595	37	0,14497	47	0,16411	57	0,18047
8	0,06782	18	0,10281	28	0,12613	38	0,14719	48	0,16653	58	0,18074
9	0,07445	19	0,10558	29	0,13025	39	0,14926	49	0,16655	59	0,18143

Tab 4.3: Valores dos níveis de energia do Nelson para $\hbar = 0.1$

0	0,0897	10	0,31435	20	0,44022	30	0,53312	40	0,61613	59	0,68335
1	0,12749	11	0,3372	21	0,4469	31	0,54286	41	0,62161	51	0,69
2	0,15977	12	0,3401	22	0,46049	32	0,55599	42	0,62942	52	0,70102
3	0,18971	13	0,35986	23	0,47283	33	0,55843	43	0,63348	53	0,70412
4	0,2169	14	0,37521	24	0,47533	34	0,55913	44	0,64401	54	0,71488
5	0,2417	15	0,38679	25	0,48748	35	0,56684	45	0,64423	55	0,716
6	0,24337	16	0,39226	26	0,49339	36	0,5801	46	0,65993	56	0,72819
7	0,26878	17	0,39942	27	0,51282	37	0,58896	47	0,66288	57	0,73414
8	0,28969	18	0,41927	28	0,51487	38	0,59853	48	0,66983	58	0,74279
9	0,29985	19	0,4233	29	0,51771	39	0,59956	49	0,6731	59	0,74501

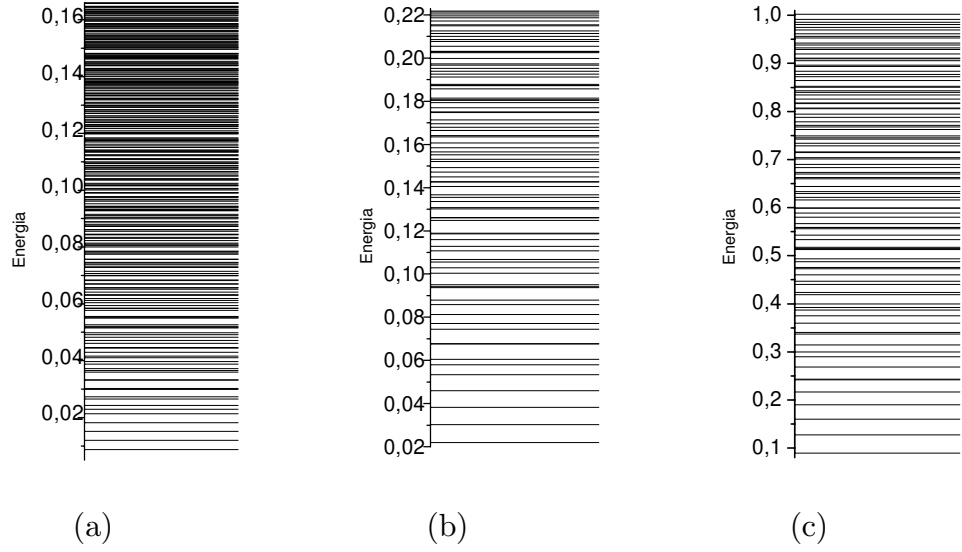


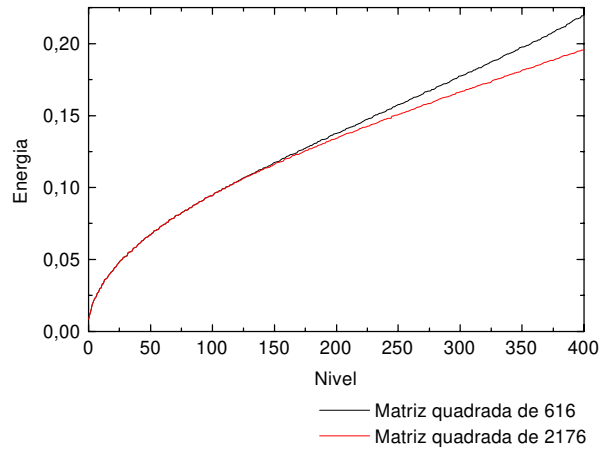
Fig. 4.2: Espectro do Nelson para:

- (a) 300 primeiros níveis e $\hbar = 0.01$;
- (b) 200 primeiros níveis e $\hbar = 0.025$;
- (c) 100 primeiros níveis e $\hbar = 0.1$

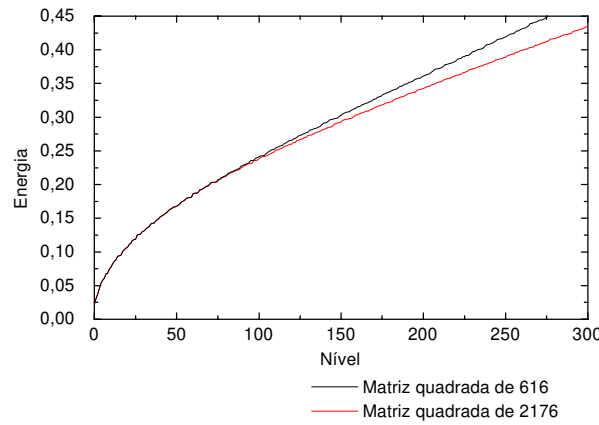
Conforme já observamos, os testes de convergência representam ferramentas importantes para avaliarmos qual o erro de cada nível, até que nível podemos usar no cálculo e qual o melhor valor de $\hbar$. Esse valor deve permitir que seja atingido um valor de energia para o qual o Nelson já apresente um comportamento quase totalmente caótico, mas haja uma quantidade não muito pequena de níveis aproveitáveis e a matriz a se diagonalizar não tenha de ser muito grande, pois no próximo passo inseriremos mais uma dimensão, na qual estará o oscilador harmônico. A matriz quadrada de ordem 2176 é excessivamente grande para se inserir mais uma dimensão com aproximadamente 30 termos. Isso daria uma matriz quadrada de mais de 60 mil linhas e colunas, ou seja, de aproximadamente 4×10^9 termos! Isso se mostrou além da capacidade das máquinas que dispomos. A matriz do Nelson que usamos tem $n_x = 43$ e $n_y = 13$, ou seja, é uma matriz com 616 linhas e colunas e quando inserida a outra dimensão temos uma matriz com pouco menos de 4×10^8 termos, que embora ainda enorme, as máquinas já aceitam.

O primeiro teste que apresentamos é justamente a comparação entre essas duas matrizes: a de ordem 616 que usaremos mais tarde com a de ordem 2176. Na figura 4.3 apresentamos para os mesmos três valores de $\hbar$ tratados acima, as curvas da energia em função do número (índice) do nível, comparando as curvas para as duas matrizes. Observamos que no primeiro caso, quando $\hbar = 0.01$, a matriz menor está bem de acordo com a outra até um valor da energia pouco maior que 0.1, o que corresponde a mais de 150 termos bons. No segundo caso, quando $\hbar$ foi aumentado para 0.025, a convergência já não atingiu tantos termos: apenas cerca de 100, mas por outro lado a energia atingida foi mais alta, um pouco superior a 0.2. No terceiro caso $\hbar$ foi drasticamente aumentado para 0.1, a o número de termos que convergiram caiu para 50 e a energia subiu para cerca de 0.7.

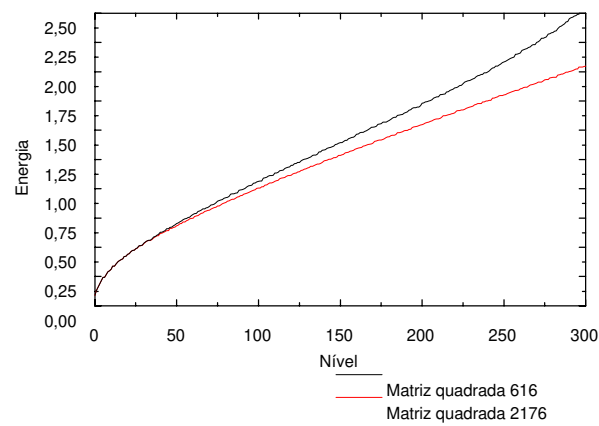
Uma forma mais precisa de se estimar a convergência dos níveis é através do gráfico de $\Delta E(n)/E(n)$ vs n (curvas verdes da figura 4.4), onde $\Delta E(n)$ é a diferença entre as energias no n -ésimo nível das mesmas duas matrizes e $E(n)$ é a energia do n -ésimo nível da matriz maior. A normalização de ΔE é importante para que se possa comparar os resultados para os três valores diferentes de $\hbar$, uma vez que a mudança desse parâmetro interfere fortemente na escala de energia. A figura 4.4 mostra os gráficos onde essas curvas são postas no mesmo sistema de eixos com o espaçamento entre os níveis (curva amarela), que é um parâmetro para sabermos qual o erro aceitável. Nos gráficos da figura 4.4, as curvas azuis são as suavizações. Podemos observar que acima, quando simplesmente comparamos as duas curvas em um sistema de eixos, superestimamos a convergência do programa. A figura nos aponta que para $\hbar = 0.01$ os cálculos com a matriz quadrada de lado 616 convergem bem até $n_{\max} \cong 110$ ($E_{\max} \cong 0.1$), para $\hbar = 0.25$, $n_{\max} \cong 70$ ($E \cong 0.2$) e para $\hbar = 0.1$, $n_{\max} \cong 30$ ($E \cong 0.53$).



(a)



(b)



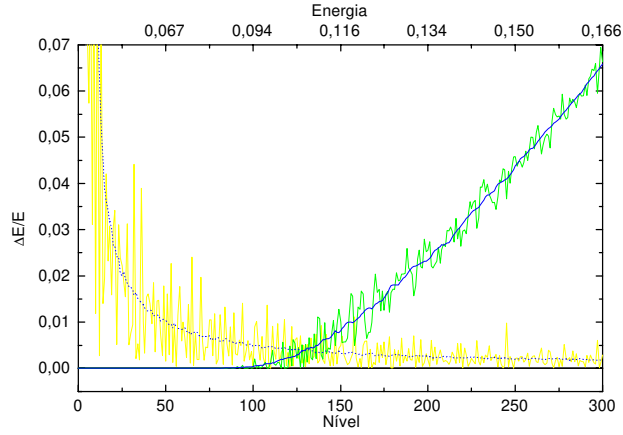
(c)

Fig. 4.3: Teste de convergência da matriz de 616 através da comparação com a de 2176.

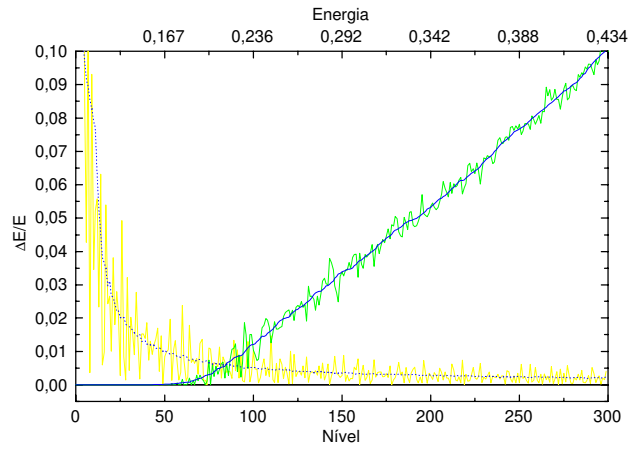
Em (a) $\hbar = 0.01$ e observamos uma convergência razoável até um valor da energia pouco maior que 0.1, pouco mais de $1/4$ dos níveis calculados.

Em (b) $\hbar = 0.25$ e a energia converge para cerca de $1/10$ dos níveis: até E pouco maior que 0.2.

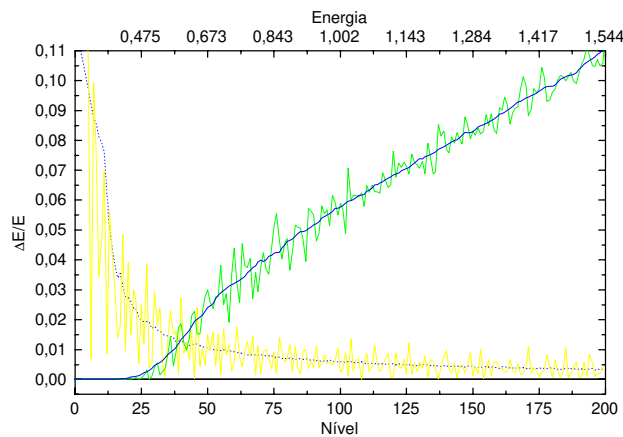
Em (c) $\hbar = 0.1$ e apenas cerca de 50 termos estão bons, mas é atingida uma energia de 0.7 unidades.



(a)



(b)

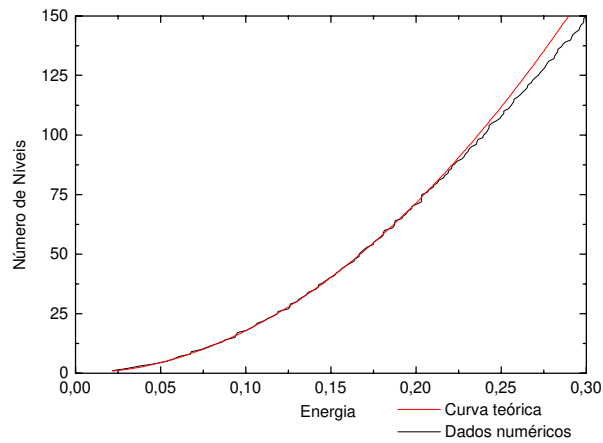


(c)

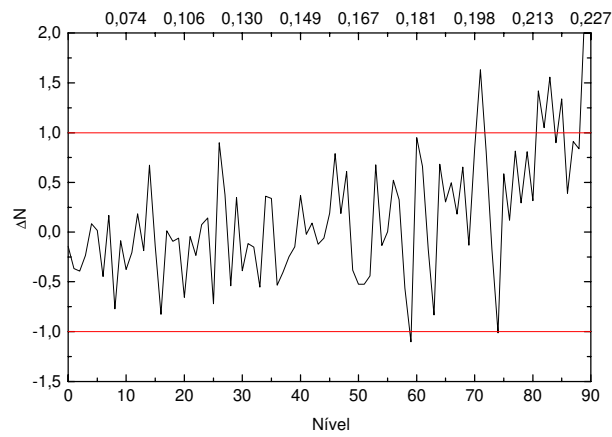
Fig 4.4: Diferença normalizada entre os autovalores das duas matrizes (verde) e entre níveis vizinhos para a matriz maior, com (a) $\hbar = 0.01$, (b) para $\hbar = 0.025$ e (c) para $\hbar = 0.1$. A reta horizontal indica, em cada gráfico, $\Delta E/E = 0$ e as curvas azuis são as suavizações das diferenças entre os autovalores (curva cheia) e do espaçamento entre níveis (curva pontilhada). Os valores da energia estão indicados nas partes superiores.

A seguir, ilustraremos os outros dois métodos de teste de convergência do programa: comparação dos números de níveis e das densidades. A vantagem desses métodos é que não necessitam de que o cálculo seja feito para duas matrizes, como a comparação anterior. Essa vantagem se torna importante quando a terceira dimensão (oscilador harmônico) é inserida, pois o cálculo é muito mais demorado. Temos preferência pela comparação entre os números de níveis teórico (médio) e numérico, porque sua visualização é mais fácil e precisa. Na figura 4.5 estão o gráfico do número de níveis (N) em função da energia e o gráfico da diferença entre os números de níveis calculados numérica e teoricamente (ΔN) em função do índice dos níveis, para $\hbar = 0.025$. O critério para o erro nos números de níveis é bastante óbvio: $|\Delta N| < 1$. Observamos que para o nível 60 temos $\Delta N < -1$, mas é a partir do nível 70 ($E = 0.198$) que o erro começa realmente a ficar grande. Devemos lembrar que estamos comparando um cálculo numérico, feito ponto a ponto, com uma média obtida teoricamente, de modo que um único ponto estar fora da condição $|\Delta N| < 1$ não implica em erro grave. Porém vemos que a partir do nível 70 a média de ΔN tende a ser maior que um. Estamos fazendo uma certa distinção entre o número de níveis e o que chamamos de índice do nível. O primeiro se refere ao número de níveis com energia *menor ou igual* a um certo valor E ao passo que o segundo pode ser encarado como o número de níveis com energia *menor* que E , nesse caso o estado fundamental é indexado como 0.

Para encerrar, a figura 4.6 traz a comparação entre a densidade média de níveis obtida analiticamente e a densidade a partir dos dados numéricos. Novamente só apresentamos o teste para $\hbar = 0.025$. O gráfico indica o mesmo limite de validade obtido anteriormente. Observemos que não é esperada a concordância entre a curva numérica e a teórica para baixas energias, pois essa última é clássica e deve ser uma boa aproximação só para altas densidades.



(a)



(b)

Fig 4.5: Comparação entre o número de níveis calculado numericamente e o número de níveis médio obtido analiticamente para $\hbar = 0.025$. (a) As duas curvas num mesmo sistema de eixos em função da energia e (b) a diferença entre os dois cálculos em função do índice dos níveis.

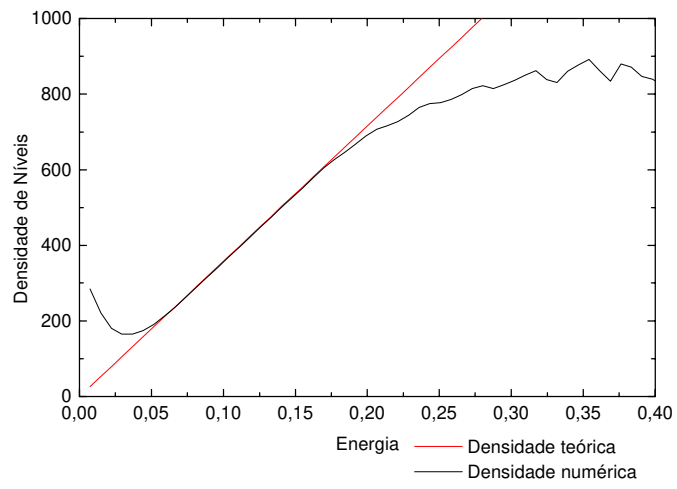


Fig 4.6: Comparação entre a densidade de níveis obtida numericamente e a densidade média calculada analiticamente para $\hbar = 0.025$.

Capítulo 5

O Oscilador Harmônico Acoplado ao Nelson: Três Graus de Liberdade

Como discutimos na introdução, vamos agora considerar o acoplamento de um sistema lento de um grau de liberdade com o Nelson. Por simplicidade, esse sistema lento será escolhido como harmônico. Neste capítulo discutiremos os procedimentos numéricos para a obtenção do espectro e das autofunções do sistema completo de três graus de liberdade. Tais procedimentos se assemelham bastante à discussão feita para o Nelson no capítulo anterior.

Consideremos o hamiltoniano

$$H(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = H_N(x, y, p_x, p_y) + H_z(z, p_z) + H_I(x, y, z) \quad (5.1)$$

onde

$$H_N = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 + \frac{\mu}{2}x^2, \quad (5.2)$$

com $\mu = 0.1$, é o hamiltoniano Nelson,

$$H_z = \frac{p_z^2}{2} + \frac{\omega^2 z^2}{2} \quad (5.3)$$

é o hamiltoniano de um oscilador Harmônico unidimensional lento, e

$$H_I = \lambda z \left(y - \frac{x^2}{2} \right) \quad (5.4)$$

é o hamiltoniano de interação com parâmetro de acoplamento λ . A escolha desse acoplamento foi feita para preservar a simetria em x e a dependência em $(y - x^2/2)$, o que otimiza os cálculos dos autovalores e autofunções.

Esse hamiltoniano representa um sistema unidimensional regular (o oscilador harmônico) fracamente acoplado a um sistema com dinâmica que pode ser caótica ou não, dependendo da energia disponível (Nelson). Essa característica do hamiltoniano Nelson de ser regular para baixas energias e caótico para energias mais altas nos permitiu uma comparação do comportamento do sistema quando era tomando um estado inicial caótico (ou quase totalmente caótico) do Nelson com quando um estado regular (como o fundamental, por exemplo) era escolhido. Esse tipo de estudo será exposto no próximo capítulo.

5.1 Densidade e Número de Níveis

Analogamente ao que foi feito para o hamiltoniano Nelson, antes de qualquer cálculo numérico devemos obter para o hamiltoniano tridimensional a expressão para a densidade de níveis de energia $\rho(E)$, bem como para o número de níveis, $N(E)$, com energia menor que um certo valor E . Da mesma forma que para o Nelson, essas expressões serão úteis para testar a convergência do programa que diagonaliza a matriz.

Seja $N(E)$ o número de níveis quânticos com energia menor ou igual a E . Sua aproximação clássica é dada por

$$\tilde{N}(E) = \frac{1}{h^3} \int \cdots \int_{\frac{1}{2} \sum p_i^2 + V(x,y,z) \leq E} dx dy dz dp_x dp_y dp_z \quad (5.5)$$

onde

$$\sum p_i^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$$

e

$$V(x, y, z) = \frac{\mu}{2}x^2 + \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 + \lambda z \left(y - \frac{x^2}{2}\right) + \frac{\omega^2}{2}z^2$$

A integral em (5.5) pode ser feita separadamente para os momenta: é o volume da esfera de raio $\sqrt{2(E - V)}$. Dessa forma temos:

$$\tilde{N}(E) = \frac{8\sqrt{2}\pi}{3h^3} \int \cdots \int_{V(x,y,z) \leq E} (E - V)^{\frac{3}{2}} dx dy dz \quad (5.6)$$

A densidade média de níveis é dada por:

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{\partial \tilde{N}(E)}{\partial E}$$

Aplicando essa definição em (5.6) temos

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int \cdots \int_{V(x,y,z) \leq E} (E - V)^{\frac{1}{2}} dx dy dz$$

Para se resolver essa integral é necessário que se faça uma mudança de variáveis adequada. É nesse ponto que se evidencia a vantagem do acoplamento escolhido. Podemos escrever V da forma:

$$V(x, y, z) = \frac{\mu}{2}x^2 + \left[\left(y - \frac{x^2}{2}\right) + \frac{\lambda}{2}z\right]^2 + \frac{(2\omega^2 - \lambda^2)}{4}z^2$$

Fazendo a mudança de variáveis

$$\begin{aligned} X &= \sqrt{\frac{\mu}{2}}x \\ Y &= \left(y - \frac{x^2}{2}\right) + \frac{\lambda}{2}z \\ Z &= \frac{\sqrt{2\omega^2 - \lambda^2}}{2}z \end{aligned}$$

o potencial fica

$$V = X^2 + Y^2 + Z^2 \equiv R^2$$

O Jacobiano dessa mudança é constante e vale

$$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mu (2\omega^2 - \lambda^2)}{2}}$$

de modo que a integral nas novas variáveis fica

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{2}{\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{\sqrt{\mu (2\omega^2 - \lambda^2)}} \int \dots \int_{X^2+Y^2+Z^2 \leq E} (E - X^2 - Y^2 - Z^2)^{\frac{1}{2}} dX dY dZ$$

Passando para coordenadas esféricas temos

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{2}{\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{\sqrt{\mu (2\omega^2 - \lambda^2)}} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{\sqrt{E}} \sqrt{E - R^2} R^2 dR d\theta d\varphi$$

Integrando em θ e φ vem

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{8}{\pi \hbar^3} \frac{1}{\sqrt{\mu (2\omega^2 - \lambda^2)}} \int_0^{\sqrt{E}} \sqrt{E - R^2} R^2 dR \quad (5.7)$$

A integral em (5.7) pode ser encontrada em tabela [22]:

$$\int x^2 \sqrt{a + cx^2} dx = \frac{1}{4} \frac{xu^3}{c} - \frac{1}{8} \frac{axu}{c} - \frac{1}{8} \frac{a^2}{c} \frac{1}{\sqrt{-c}} \arcsin x \sqrt{-\frac{c}{a}}$$

com $c < 0$ e $a > 0$. Dessa forma chegamos finalmente a

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{1}{2\hbar^3} \frac{E^2}{\sqrt{\mu (2\omega^2 - \lambda^2)}} \quad (5.8)$$

O número de níveis também pode ser obtido simplesmente integrando essa expressão:

$$\tilde{N}(E) = \frac{1}{6\hbar^3} \frac{E^3}{\sqrt{\mu(2\omega^2 - \lambda^2)}} \quad (5.9)$$

5.2 Os Elementos de Matriz

O hamiltoniano do nosso sistema total ainda é um polinômio. Mais que isso, ele é o Nelson somado a um oscilador harmônico e a um termo de interação do tipo de um dos termos presentes no Nelson. Fica óbvio, então, que a base a ser usada na diagonalização desse hamiltoniano ainda é a do oscilador harmônico. O cálculo apresentado a seguir é bastante semelhante ao feito para o Nelson no capítulo anterior.

Na forma cartesiana temos

$$p_k = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x_k},$$

onde $k=1,2,3$ para x, y e z , respectivamente, e o hamiltoniano (5.1) fica

$$H = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \left(y - \frac{x^2}{2} \right)^2 + \frac{\mu}{2} x^2 + \frac{\omega^2 z^2}{2} + \lambda z \left(y - \frac{x^2}{2} \right)$$

Façamos uma mudança de variáveis como a feita para o Nelson:

$$\begin{aligned} Q_1 &= x \\ Q_2 &= y - \frac{x^2}{2} \\ Q_3 &= z \end{aligned} \quad (5.10)$$

Calculando $\partial/\partial x_k$ nessas coordenadas temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2}{\partial Q_1^2} + Q_1^2 \frac{\partial^2}{\partial Q_2^2} - 2Q_1 \frac{\partial^2}{\partial Q_1 \partial Q_2} - \frac{\partial}{\partial Q_2} \\ \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \frac{\partial^2}{\partial Q_2^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial z^2} &= \frac{\partial^2}{\partial Q_3^2} \end{aligned} \quad (5.11)$$

e o hamiltoniano fica

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial Q_1^2} + (Q_1^2 + 1) \frac{\partial^2}{\partial Q_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial Q_3^2} - 2Q_1 \frac{\partial^2}{\partial Q_1 \partial Q_2} - \frac{\partial}{\partial Q_2} \right] + \frac{\mu}{2} Q_1^2 + Q_2^2 + \frac{\omega^2 Q_3^2}{2} + \lambda Q_2 Q_3 \quad (5.12)$$

Definindo os operadores momentum nas novas coordenadas generalizadas

$$\hat{P}_k = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial Q_k}$$

e substituindo em (5.12) vem

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_1^2}{2} + \left(\hat{Q}_1^2 + 1 \right) \frac{\hat{P}_2^2}{2} + \frac{\hat{P}_3^2}{2} - \hat{Q}_1 \hat{P}_1 \hat{P}_2 + \frac{i\hbar}{2} \hat{P}_2 + \frac{\mu}{2} \hat{Q}_1^2 + \hat{Q}_2^2 + \frac{\omega^2 \hat{Q}_3^2}{2} + \lambda \hat{Q}_2 \hat{Q}_3 \quad (5.13)$$

Como no capítulo anterior, podemos escrever $\hat{P}_k$ e $\hat{Q}_k$ em termos dos operadores de criação e destruição, $\hat{a}^\dagger$ e $\hat{a}$, respectivamente:

$$\begin{aligned} \hat{P}_k &= \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}} i \left(\hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_k \right) \\ \hat{Q}_k &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} \left(\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k \right) \end{aligned} \quad (5.14)$$

Dessa forma não é difícil calcular os elementos de matriz do hamiltoniano usando o mesmo procedimento exposto para o Nelson. Os elementos de matriz não nulos são os enumerados abaixo e seus respectivos complexo-conjugados:

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 n_2 n_3 \rangle = \left[\frac{\hbar}{4\omega_1} (\mu + \omega_1^2) (2n_1 + 1) + \frac{\hbar}{4\omega_2} (2 + \omega_2^2) (2n_2 + 1) + \frac{\hbar}{4\omega_1} \frac{\hbar\omega_2}{2} (2n_1 + 1) (2n_2 + 1) + \frac{\hbar}{4\omega_2} (\omega^2 + \omega_3^2) (2n_3 + 1) \right]$$

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 n_3 \rangle = \frac{\left[\frac{\hbar}{4\omega_1} (\mu - \omega_1^2) + \frac{\hbar}{4\omega_1} \frac{\hbar\omega_2}{2} (2n_2 + 1) \right]}{\sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)}} \times$$

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 n_2 + 2 \ n_3 \rangle = \frac{\left[\frac{\hbar}{4\omega_2} (2 - \omega_1^2) - \frac{\hbar}{4\omega_1} \frac{\hbar\omega_2}{2} (2n_1 + 1) \right]}{\sqrt{(n_2 + 1)(n_2 + 2)}} \times$$

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 + 2n_2 + 2 \ n_3 \rangle = \frac{-\frac{\hbar}{4\omega_1} \frac{\hbar\omega_2}{2} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)}}{\sqrt{(n_2 + 1)(n_2 + 2)}} \times$$

$$\langle n_1 n_2 + 2 \ n_3 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 \ n_3 \rangle = \frac{-\frac{\hbar}{4\omega_1} \frac{\hbar\omega_2}{2} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)}}{\sqrt{n_2(n_2 - 1)}} \times$$

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 + 1 \ n_3 \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\hbar\omega_2}{2}} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \sqrt{n_2 + 1}$$

$$\langle n_1 n_2 + 1 \ n_3 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 \ n_3 \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\hbar\omega_2}{2}} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \sqrt{n_2}$$

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 n_2 \ n_3 + 2 \rangle = \frac{\hbar}{4\omega_3} (\omega^2 - \omega_1^2) \sqrt{(n_3 + 1)(n_3 + 2)}$$

$$\langle n_1 n_2 \ n_3 | \hat{H} | n_1 n_2 + 1 \ n_3 + 1 \rangle = \lambda \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{\omega_2 \omega_3}} \sqrt{(n_2 + 1)} \sqrt{(n_3 + 1)}$$

$$\langle n_1 n_2 + 1 \ n_3 | \hat{H} | n_1 n_2 \ n_3 + 1 \rangle = \lambda \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{\omega_2 \omega_3}} \sqrt{n_2} \sqrt{(n_3 + 1)}$$

Mais uma vez, não há restrições sobre os valores de ω_1 , ω_2 e ω_3 , mas é conveniente escolher $\omega_1 = \sqrt{\mu}$, $\omega_2 = \sqrt{2}$ e $\omega_3 = \omega$. Com essa escolha, os elementos de matriz são

sensivelmente simplificados e ficam

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 n_2 n_3 \rangle = \left[\hbar \sqrt{\mu} \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar \sqrt{2} \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2} \sqrt{\frac{2}{\mu}} \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar \omega^2}{\sqrt{2}} \left(n_3 + \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 n_3 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \sqrt{\frac{2}{\mu}} \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)}$$

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 n_2 + 2 \ n_3 \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \sqrt{\frac{2}{\mu}} \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \sqrt{(n_2 + 1)(n_2 + 2)}$$

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 + 2 n_2 + 2 \ n_3 \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \sqrt{\frac{2}{\mu}} \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \times \sqrt{(n_2 + 1)(n_2 + 2)}$$

$$\langle n_1 n_2 + 2 \ n_3 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 \ n_3 \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \sqrt{\frac{2}{\mu}} \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \times \sqrt{n_2(n_2 - 1)}$$

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 + 1 \ n_3 \rangle = \hbar \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{2}}} \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \sqrt{n_2 + 1}$$

$$\langle n_1 n_2 + 1 \ n_3 | \hat{H} | n_1 + 2 \ n_2 \ n_3 \rangle = -\frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\hbar \omega_2}{2}} (2n_1 + 1) \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2)} \sqrt{n_2}$$

$$\langle n_1 n_2 n_3 | \hat{H} | n_1 n_2 \ n_3 + 2 \rangle = \frac{\hbar}{4\omega} (\omega^2 - \mu) \sqrt{(n_3 + 1)(n_3 + 2)}$$

$$\langle n_1 n_2 \ n_3 | \hat{H} | n_1 n_2 + 1 \ n_3 + 1 \rangle = \lambda \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{\omega \sqrt{2}}} \sqrt{(n_2 + 1)} \sqrt{(n_3 + 1)}$$

$$\langle n_1 n_2 + 1 \ n_3 | \hat{H} | n_1 n_2 \ n_3 + 1 \rangle = \lambda \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{\omega \sqrt{2}}} \sqrt{n_2} \sqrt{(n_3 + 1)}$$

5.3 O Cálculo Numérico

A diagonalização dessa matriz é feita numericamente através de um programa bastante semelhante ao que diagonaliza o Nelson. A mesma rotina (EIGRS do pacote IMSL) foi utilizada. Como já mencionamos, a convergência do programa pode ser testada através da comparação entre a densidade e o número de níveis calculados acima e os obtidos numericamente usando as energias encontradas, de forma idêntica ao discutido para o hamiltoniano Nelson. Observemos que tomando os elementos de matriz acima com $\omega = \omega_3 = 0$ e desconsiderando os termos com acoplamento, podemos obter a matriz do Nelson.

Mais uma vez, a simetria na coordenada x facilita os cálculos, uma vez que podemos separar os termos com simetria par dos com simetria ímpar em x , e desse modo ao invés de diagonalizarmos uma matriz de $N \times N$, diagonalizamos duas de $N/2 \times N/2$. Isso possibilita a otimização do programa e é especialmente importante nesse caso em que a matriz a ser diagonalizada é bastante grande.

5.4 Resultados Numéricos

Para os cálculos numéricos de diagonalização da matriz usamos $n_{1_{\max}} = 43$, $n_{2_{\max}} = 13$ e $n_{3_{\max}} = 29$. Tomando $\hbar = 0.025$ e $\omega = 0.25$, esse valor de $n_{3_{\max}}$ nos dá um oscilador harmônico com energia máxima igual a 0.184. Do capítulo anterior sabemos que a energia máxima do Nelson para a qual o cálculo é confiável está próxima desse valor. Considerando que as energias dos estados fundamentais do Nelson e do oscilador são bem próximas de zero e desprezando a energia de acoplamento podemos argumentar que esse também é o máximo valor da energia do sistema total na qual podemos confiar, uma vez que os valores da energia desse sistema serão aproximadamente combinações (somas) dos níveis do Nelson com os do oscilador, e para energias maiores que aproximadamente 0.19 certamente estarão faltando níveis de algum dos sistemas.

Os valores de ω e de $n_{3_{\max}}$ foram escolhidos de forma que a matriz não fique maior que a capacidade das máquinas disponíveis e nem o oscilador apresente movimento rápido

comparado com o Nelson. Como já mencionamos no capítulo anterior, o cuidado com a magnitude da matriz também teve que ser tomado na escolha de $\hbar$ e do tamanho da matriz do Nelson.

Fizemos os cálculos para $n_{1\max} = 43$, $n_{2\max} = 13$, $n_{3\max} = 29$, $\hbar = 0.025$, $\omega = 0.25$, $\mu = 0.1$ e $\lambda = 0,05$. Para possibilitar algumas comparações, fizemos alguns cálculos também com $\lambda = 0$ (que corresponde aos sistemas desacoplados), $\lambda = 0,01$ e $\lambda = 0,1$. Abaixo estão os espectros para esses diferentes valores do acoplamento. Da figura 5.1 pode-se constatar que o acoplamento 0.01 já altera o espectro, embora muito pouco, enquanto que o acoplamento 0.1 provoca uma alteração acentuada. Em todos os casos, o acoplamento diminui a energia dos níveis, como pode ser verificado por (5.9).

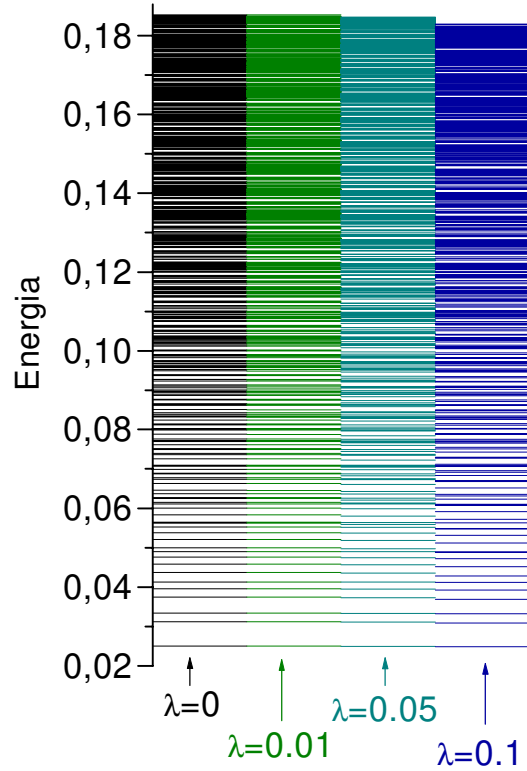


Fig. 5.1: Espectro do sistema total (600 primeiros níveis) para quatro valores do acoplamento, conforme indicado na figura.

Os testes para verificar a convergência dos cálculos são essencialmente os mesmos discutidos no capítulo anterior. Aqui apresentaremos a comparação entre os números de níveis teóricos e obtidos numericamente. Na figura 5.2 estão as curvas do número

de níveis em função da energia, tanto a obtida pelo o cálculo analítico como a calculada numericamente, para $\lambda = 0$. As figuras 5.3 e 5.4 expõem os mesmos gráficos, mas para $\lambda = 0.05$ e $\lambda = 0.1$, respectivamente. Observamos que em todos os casos as curvas começam a "descolar " para energias maiores que 0.2, e já sabemos, da convergência do Nelson e da energia máxima do oscilador harmônico, que não podemos usar energias superiores a essa. Observemos que a convergência piora conforme se aumenta o acoplamento.

Como já indicamos acima, o valor do acoplamento por nós escolhido foi $\lambda = 0,05$. Essa escolha se deve ao fato de que um acoplamento maior, além de piorar a convergência, é inadequado ao estudo por nós proposto — tal acoplamento não seria um acoplamento fraco, como desejamos, para estudar a interação entre os sistemas, mas transformaria o problema em um sistema tridimensional, e não dois sistemas acoplados.

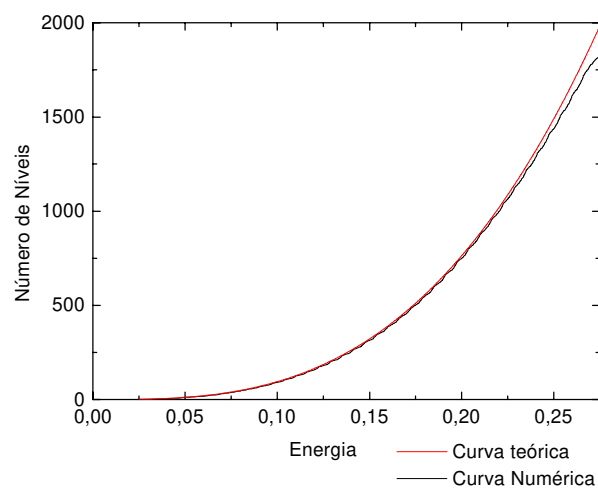


Fig 5.2: Testes da convergência dos cálculos dos autovalores para $\lambda = 0$.

Curva do número de níveis em função da energia obtida numericamente confrontada com a deduzida analiticamente.

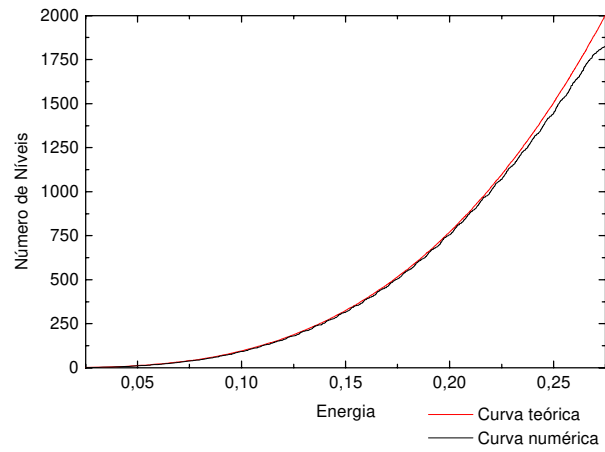


Fig 5.3: Testes da convergência dos cálculos dos autovalores para $\lambda = 0.05$.

Curva do número de níveis em função da energia obtida numericamente confrontada com a deduzida analiticamente.

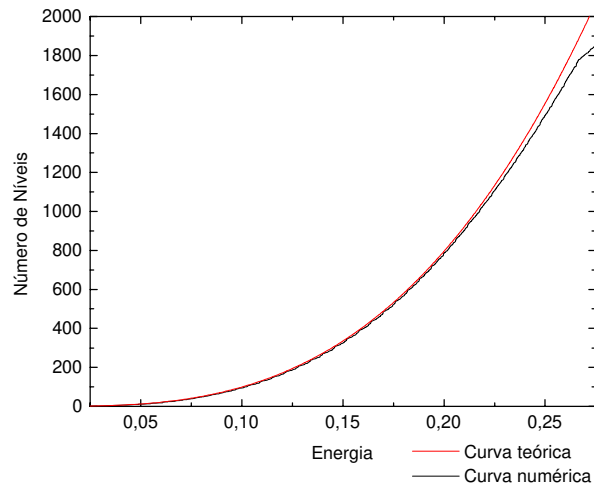


Fig 5.4: Testes da convergência dos cálculos dos autovalores para $\lambda = 0.1$.

Curva do número de níveis em função da energia obtida numericamente confrontada com a deduzida analiticamente.

Capítulo 6

Evolução Temporal de um Pacote

Neste capítulo estudaremos os efeitos do acoplamento, H_I , do oscilador harmônico com o Nelson através da evolução de um pacote de ondas. É essa a parte principal do trabalho desenvolvido, pois é através da evolução do pacote que investigaremos como se dá a troca de energia entre os sistemas, calculando as médias nas energias do Nelson e do oscilador harmônico. Desse modo, poderemos fazer a desejada comparação dos resultados por nós obtidos com o comportamento clássico de um sistema semelhante, estudado por T. de Carvalho e M. A. M. de Aguiar [5, 6].

Sejam $|k\rangle$ os estados obtidos a partir da diagonalização do hamiltoniano total e $|\varphi_l\rangle$ a base de osciladores que escolhemos para fazer a diagonalização, exposta nos capítulos anteriores. Podemos escrever $|k\rangle$ em termos da base antiga:

$$|k\rangle = \sum_l d_{lk} |\varphi_l\rangle \quad (6.1)$$

onde d_{lk} são os elementos da matriz obtida na diagonalização, isto é,

$$\begin{pmatrix} d_{1k} \\ d_{2k} \\ \vdots \\ d_{mk} \end{pmatrix} = |k\rangle$$

Escolhemos como estado inicial $|\psi_0\rangle$ o produto de um autoestado do hamiltoniano Nelson $|n\rangle$ com um estado coerente do oscilador harmônico $|u\rangle$:

$$|\psi_0\rangle = |n\rangle \otimes |u\rangle \quad (6.2)$$

O estado coerente $|u\rangle$ tem a propriedade de evoluir de forma semelhante a um pacote clássico e é definido por

$$|u\rangle = e^{-\frac{|u|^2}{2}} e^{ua_3^\dagger} |0\rangle_z$$

onde

$$u = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(\langle z \rangle + \frac{i \langle p_z \rangle}{\omega} \right)$$

e $|0\rangle_z$ é o estado fundamental do oscilador H_z [23, 24].

Podemos escrever $|\psi_0\rangle$ em termos dos autoestados $|k\rangle$:

$$|\psi_0\rangle = \sum_k c_k(n, u) |k\rangle$$

Portanto

$$c_k(n, u) = \langle k | \psi_0 \rangle . \quad (6.3)$$

Substituindo (6.1) em (6.3) vem

$$c_k(n, u) = \sum_l d_{lk} \langle \varphi_l | \psi_0 \rangle \quad (6.4)$$

onde usamos o fato de que d_{lk} é real. A base $|\varphi_l\rangle$ é o produto de uma base em (x, y) e outra em z . Podemos então escrever:

$$|\varphi_l\rangle = |B_{xy}^l\rangle \otimes |m_z^l\rangle . \quad (6.5)$$

Logo

$$\langle \varphi_l | \psi_0 \rangle = [\langle B_{xy}^l | \otimes \langle m_z^l |] [|n\rangle \otimes |u\rangle] = \langle B_{xy}^l | n \rangle \langle m_z^l | u \rangle \quad (6.6)$$

Como $|u\rangle$ representa o estado coerente do oscilador harmônico, $\langle m_z^l | u \rangle$ pode ser facilmente calculado:

$$\langle m_z^l | u \rangle = e^{-\frac{|u|^2}{2}} \frac{u^{m_z^l}}{\sqrt{m_z^l}} . \quad (6.7)$$

Para calcular $\langle B_{xy}^l | n \rangle$, escrevemos o autoestado $|n\rangle$ do Nelson em termos de $|B_{xy}^l\rangle$, usando os elementos (reais) da matriz obtida com a diagonalização do Nelson, e_{jn} :

$$|n\rangle = \sum_j e_{jn} |B_{xy}^j\rangle$$

de onde vem

$$\langle B_{xy}^l | n \rangle = e_{ln} \quad (6.8)$$

Substituindo (6.7) e 6.8 em (6.6) vem

$$\langle \varphi_l | \psi_0 \rangle = e_{ln} e^{-\frac{|u|^2}{2}} \frac{u^{m_z^l}}{\sqrt{m_z^l}} .$$

Substituindo em (6.4) vem

$$c_k(n, u) = \sum_l d_{lk} e_{ln} e^{-\frac{|u|^2}{2}} \frac{u^{m_z^l}}{\sqrt{m_z^l}} \quad (6.9)$$

Seja $|\psi(t)\rangle$ o estado $|\psi_0\rangle$ após a evolução no tempo:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\psi_0\rangle = \sum_k c_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} |k\rangle \quad (6.10)$$

Duas coisas nos interessam: a visualização desse estado como um pacote, de forma a podermos identificar distorções nele, perda de energia, etc — como em uma distribuição em mecânica clássica — e o cálculo das energias médias do Nelson e do oscilador quando esse pacote se propaga.

6.1 Evolução Temporal do Pacote

Para visualizar esse estado como um pacote movendo-se no plano $z-p_z$, devemos projetar o $|\psi(t)\rangle$ em um estado coerente do oscilador harmônico, $|v(z, p_z)\rangle$ e integrar sobre as variáveis x e y . Queremos calcular

$$\begin{aligned} P_v &= \int |\langle xyv | \psi(t) \rangle|^2 dx dy = \int \left| \sum_n \langle xyv | n \rangle \langle n | \psi(t) \rangle \right|^2 dx dy \\ &= \sum_{n n'} \langle nv | \psi \rangle \langle \psi | n'v \rangle \int \phi_n(xy) \phi_{n'}^*(xy) dx dy = \sum_{n n'} \langle nv | \psi \rangle \langle \psi | n'v \rangle \delta_{nn'} \end{aligned} \quad (6.11)$$

onde $\phi_n(xy) = \langle xy | n \rangle$. Então temos

$$P_v = \sum_n |\langle nv | \psi(t) \rangle|^2$$

De (6.10), (6.1) e (6.5)

$$\langle v | = \sum_m e^{-\frac{|v|^2}{2}} \frac{\bar{v}^m}{\sqrt{m!}} \langle m |$$

(com $v = v(z, p_z)$) vem

$$P_v = \sum_n \left| \sum_{k l} c_k e^{-\frac{|v|^2}{2}} \frac{\bar{v}^{m_z^l}}{\sqrt{m_z^l!}} d_{lk} e_{ln} e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \right|^2 \quad (6.12)$$

com c_k dado por (6.9).

Julgamos pertinente tecer alguns comentários a respeito dos índices presentes em (6.12). O índice k representa os autoestados do hamiltoniano total, é o índice da colunas da matriz. Desse modo, $k = 1, 2, \dots, M$, onde M é determinado pelos testes de convergência expostos no capítulo anterior: M é o número de estados bons segundo esse teste. O índice l indica as linhas da matriz. Temos $l = 1, 2, \dots, l_f$, onde l_f é o número de linhas, que corresponde à dimensão da matriz diagonalizada. O índice m_z^l será obtido a partir de l . Da forma como ordenamos a matriz antes da diagonalização (Capítulo 5), temos que para l variando de 1 até N_{xy} (onde N_{xy} é a dimensão da matriz do hamiltoniano

Nelson) $m_z^l = 0$. No intervalo seguinte $m_z^l = 1$, e assim por diante, até $m_z^l = m_{z \text{ max}}$. É fácil ver que $l = m_z^l \times N_{xy} + n$, onde $n = 1, 2, \dots, N_{xy}$.

6.2 As Energias Médias

Nessa seção estudaremos o comportamento das energias médias em função do tempo. A confiabilidade dos resultados será testada verificando se a energia total permanece constante.

6.2.1 A energia do oscilador harmônico

A energia média do oscilado harmônico é dada por

$$E_z = \langle \psi(t) | H_z | \psi(t) \rangle \quad (6.13)$$

onde $|\psi(t)\rangle$ é o estado definido em (6.10) e

$$H_z = \frac{p_z^2}{2} + \frac{\omega^2 z^2}{2} . \quad (6.14)$$

Usando as equações (6.1) e (6.5) e observando que $|m_z^l\rangle$ é um autoestado de H_z temos

$$H_z |k\rangle = \sum_l d_{lk} |B_{xy}^l\rangle \otimes H_z |m_z^l\rangle = \sum_l \hbar\omega \left(m_z^l + \frac{1}{2}\right) d_{lk} |B_{xy}^l\rangle \otimes |m_z^l\rangle$$

Substituindo essa equação em (6.13) e observando que

$$\sum_l \left| \sum_k c_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} d_{lk} \right|^2 = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$$

vem

$$E_z = \frac{\hbar\omega}{2} + \hbar\omega \sum_l m_z^l \left| \sum_k c_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} d_{lk} \right|^2 \quad (6.15)$$

com c_k dado por (6.9).

6.2.2 A energia do Nelson

A energia média do Nelson é

$$E_N = \langle \psi(t) | H_N | \psi(t) \rangle \quad (6.16)$$

onde H_N é o hamiltoniano Nelson, dado por

$$H_N = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{\mu}{2}x^2 + \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2$$

e $|\psi(t)\rangle$ está definido em (6.10). Usando (6.1) e (6.5) vem

$$\langle k' | H_N | k \rangle = \sum_{ll'} d_{lk} d_{l'k'} \langle m_z^{l'} | m_z^l \rangle \otimes \langle B_{xy}^{l'} | H_N | B_{xy}^l \rangle$$

Mas

$$\langle B_{xy}^{l'} | H_N | B_{xy}^l \rangle = \langle n_1^{l'} n_2^{l'} | H_N | n_1^l n_2^l \rangle \equiv N_{l'l}$$

são os elementos de matriz do Nelson obtidos no capítulo 4. Substituindo tudo em (6.16)

e separando as somas em l , vem

$$\begin{aligned} E_N = & \sum_l N_{ll} \left| \sum_k d_{lk} c_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \right|^2 + \sum_l \sum_{l'=1}^{l-1} \delta_{m_z m'_z} \sum_k d_{lk} c_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \sum_{k'} d_{l'k'} \bar{c}_{k'} e^{\frac{iE_{k'} t}{\hbar}} + \\ & \sum_l \sum_{l'=l+1}^{l_f} \delta_{m_z m'_z} \sum_k d_{lk} c_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \sum_{k'} d_{l'k'} \bar{c}_{k'} e^{\frac{iE_{k'} t}{\hbar}} . \end{aligned}$$

Trocando l com l' na última soma vemos que ela é o complexo conjugado da segunda e chegamos a

$$E_N(t) = \sum_l N_{ll} \left| \sum_k d_{lk} c_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \right|^2 + 2 \sum_l \sum_{l'=1}^{l-1} \delta_{m_z m'_z} \operatorname{Re} \left\{ \sum_k d_{lk} c_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \sum_{k'} d_{l'k'} \bar{c}_{k'} e^{\frac{iE_{k'} t}{\hbar}} \right\}$$

6.2.3 A energia de interação

Uma forma eficiente de conferir os cálculos é verificando se a energia total, a soma da energia média do Nelson com a do oscilador e a de interação, é constante. É por essa razão que temos o interesse de calcular essa última.

A energia de interação é dada por

$$E_I \equiv \langle \psi(t) | H_I | \psi(t) \rangle$$

onde H_I é o hamiltoniano de interação, dado por

$$H_I = \lambda z \left(y - \frac{x^2}{2} \right)$$

e $|\psi(t)\rangle$ é o pacote definido em (6.10)

$$E_I = \sum_k c_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \sum_{k'} \bar{c}_{k'} e^{\frac{iE_{k'} t}{\hbar}} \langle k' | H_I | k \rangle$$

Usando, mais uma vez, (6.1) e (6.5) vem

$$\langle k' | H_I | k \rangle = \lambda \sum_{ll'} d_{lk} d_{l'k'} \left\langle B_{xy}^{l'} \left| \left(y - \frac{x^2}{2} \right) \right| B_{xy}^l \right\rangle \otimes \left\langle m_z^{l'} \left| z \right| m_z^l \right\rangle$$

Usando a mudança de variáveis introduzida no capítulo anterior,

$$\begin{aligned} Q_1 &= x \\ Q_2 &= y - \frac{x^2}{2} \\ Q_3 &= z \end{aligned} \tag{6.17}$$

ficamos com

$$\langle k' | H_I | k \rangle = \lambda \sum_{ll'} d_{lk} d_{l'k'} \left\langle B_{xy}^{l'} \left| Q_2 \right| B_{xy}^l \right\rangle \otimes \left\langle m_z^{l'} \left| Q_3 \right| m_z^l \right\rangle$$

$$= \lambda \sum_{ll'} d_{lk} d_{l'k'} \delta_{n_1^l n_1^{l'}} \langle n_2^{l'} | Q_2 | n_2^l \rangle \langle m_z^{l'} | Q_3 | m_z^l \rangle$$

Escrevendo Q_2 e Q_3 em termos dos operadores de criação e aniquilação

$$\hat{Q}_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}} (\hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_k)$$

ficamos com

$$\begin{aligned} \langle k' | H_I | k \rangle &= \frac{\lambda \hbar}{2^{5/4} \sqrt{\omega}} \sum_{ll'} d_{lk} d_{l'k'} \delta_{n_1^l n_1^{l'}} \left[\sqrt{n_2^l + 1} \delta_{n_2^l+1 n_2^{l'}} + \sqrt{n_2^l} \delta_{n_2^l-1 n_2^{l'}} \right] \times \\ &\times \left[\sqrt{n_3^l + 1} \delta_{n_3^l+1 n_3^{l'}} + \sqrt{n_3^l} \delta_{n_3^l-1 n_3^{l'}} \right] \end{aligned}$$

Voltando para a expressão de E_I temos, finalmente

$$E_I(t) = \sum_k |c_k|^2 \langle k | H_I | k \rangle + 2 \sum_k \sum_{k'=1}^{k-1} \delta_{m_z m'_z} \text{Re} \left\{ c_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \bar{c}_{k'} e^{\frac{iE_{k'} t}{\hbar}} \langle k' | H_I | k \rangle \right\}$$

6.2.4 A energia renormalizada do oscilador harmônico

Se tivéssemos um oscilador isolado, seria verdade que $E_z = H_z = \text{const.}$. Porém, não é esse o caso: o oscilador está fracamente acoplado ao Nelson, e conforme vimos nos cálculos acima (e veremos nos gráficos da próxima seção) sua energia varia com o tempo. No capítulo 3, mostramos que se o movimento do oscilador puder ser considerado adiabático, do teorema adiabático (capítulo 2) o volume compreendido pela superfície de energia do Nelson, Ω , é constante

$$\Omega = 2\pi^2 \sqrt{\frac{2}{\mu}} \left[E - \left(H_z - \frac{\lambda^2 z^2}{4} \right) \right] = \text{const.}$$

Impondo essa condição, como a energia total do sistema é uma constante (o sistema total está isolado), ao invés de H_z constante temos

$$H_z - \frac{\lambda^2 z^2}{4} = \text{const.}$$

Definimos então a energia renormalizada como sendo essa energia que deve ficar constante:

$$E_{z_r} = E_z - \frac{\lambda^2 z^2}{4}$$

O termo $-\frac{\lambda^2 z^2}{4}$ é o potencial renormalizador de Born-Oppenheimer.

Calcularemos o valor médio dessa energia. O que se espera é que — como no caso clássico (seção 3.3) — ela diminua as oscilações que aparecerão na energia do oscilador (por causa da interação com o Nelson), e que, havendo de fato dissipação, ela apresente uma tendência de decrescer.

Observemos, também, que podemos falar em um hamiltoniano corrigido para o oscilador,

$$H_{z_r} = H_z - \frac{\lambda^2 z^2}{4} = \frac{p_z^2}{2} + \frac{\left[\omega^2 - \frac{\lambda^2}{2}\right] z^2}{2} = \frac{p_z^2}{2} + \frac{\tilde{\omega}^2 z^2}{2}$$

com

$$\tilde{\omega}^2 = \omega^2 - \frac{\lambda^2}{2} \tag{6.18}$$

Surge, dessa forma, uma correção na frequência, por causa da aproximação de Born-Oppenheimer. Faremos uso dessa correção, na seção seguinte, não só no cálculo das energias médias, mas também da projeção do pacote no espaço de fase, verificando se os pacotes se superpõem quando se corrigem os períodos dessa forma.

Quanto à expressão do valor média de E_{z_r} , temos

$$E_{z_r} \equiv \langle H_{z_r} \rangle = \langle H_z \rangle - \frac{\lambda^2}{2\mu} \langle z^2 \rangle$$

A primeira média do lado direito já foi calculada, e portanto precisamos calcular apenas

$\langle z^2 \rangle$. Como o cálculo é simples mas enfadonho, apresentamos apenas o resultado final:

$$E_{z_r}(t) = \left(1 - \frac{\lambda^2}{4\omega^2}\right) E_z(t) - \frac{\lambda^2 \hbar}{4\omega} \sum_l \sqrt{(m_z^l + 2)(m_z^l + 1)} \sum_k \left\{ d_{lk} k_{l'k} |c_k|^2 + \right. \\ \left. + \sum_{k'=1}^{k-1} (d_{lk} d_{l'k'} + d_{l'k} d_{lk'}) \operatorname{Re} \left[c_k \bar{c}_{k'} e^{-\frac{i(E_k - E_{k'})t}{\hbar}} \right] \right\}$$

onde

$$l' = l + 2N_{xy}$$

6.3 Resultados Numéricos

Nesta seção apresentaremos os principais resultados obtidos. Em primeiro lugar, apresentaremos a visualização da evolução do pacote no plano $z - p_z$, que é bastante semelhante à evolução temporal de um estado coerente do oscilador harmônico, que também apresentaremos, para fins de comparação. Em seguida serão expostas as energias de cada sistema em função do tempo, permitindo a observação de como se deu a troca de energia entre eles. O caso com acoplamento zero, ou seja, para os sistemas desacoplados, será comparado com a situação de acoplamento não-nulo.

6.3.1 Evolução temporal do pacote

Como apresentado anteriormente, visualizamos a evolução do pacote no plano $z - p_z$ projetando o pacote em um estado coerente do oscilador harmônico $|v(z, p_z)\rangle$ varrendo um intervalo desse plano e integrar sobre as variáveis x e y :

$$P_v(z, p_z) = \int |\langle xyv | \psi(t) \rangle|^2 dx dy = \sum_n |\langle nv | \psi(t) \rangle|^2$$

Como consequência do Princípio da Incerteza em Mecânica Quântica não podemos falar em distribuição no espaço de fases como no caso clássico. A função P_v acima, chamada *Função de Husimi* [25, 26], uma suavização da função de Wigner, é o que mais se aproxima

da distribuição clássica. Consideremos a projeção de um autoestado do operador $\mathbf{z}$ sobre estados $\langle z' |$ e sobre $\langle p'_z |$. Teremos uma função delta e uma onda plana, respectivamente. Já as projeções de um estado coerente sobre esses espaços são gaussianas centradas em $\langle z \rangle$ e $\langle p_z \rangle$. Além disso os estados coerentes se comportam de forma semelhante ao oscilador clássico para um hamiltoniano de oscilador harmônico. É natural, então a idéia de se projetar os estados que se deseja estudar sobre os estados coerentes para se obter, em Mecânica Quântica, uma função análoga à distribuição no espaço de fases, um conceito clássico. Obtemos, assim, um espaço de fases cujos eixos são os valores médios $\langle z \rangle$ e $\langle p_z \rangle$, que são os análogos quânticos das variáveis canônicas clássicas. O efeito dessa função no nosso sistema é tirar a média do movimento do Nelson para ter o resultado global desse movimento sobre o oscilador lento.

Conforme já apontamos, como estado inicial tomamos o produto de um autoestado no Nelson, que indicaremos por $|Nel\rangle$, com um estado coerente do oscilador harmônico, $|u\rangle$, dado por

$$|u\rangle = e^{-\frac{|u|^2}{2}} e^{ua_3^\dagger} |0\rangle_z$$

onde

$$u = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(z_0 + \frac{ip_{z_0}}{\omega} \right).$$

Escolhemos $|u|^2 = 5.5$, $z_0 = 0$, $\omega = 0.25$ e $\hbar = 0.025$, o que corresponde a um estado coerente com energia média inicial de 0.0375. A figura 6.1 abaixo ilustra a evolução temporal de um estado coerente de oscilador hamônico para esses parâmetros com os sistemas *desacoplados*. Na mesma figura está a evolução do mesmo estado coerente, porém obtida de forma exata pelo *software Mathematica*, e não numericamente. Essa comparação nos permite avaliar graficamente a importância dos erros numéricos. Os pacotes foram evoluídos por três períodos do oscilador ($3 \times 2\pi/\omega$), com intervalos de um quarto de período entre cada imagem presente no gráfico, sendo que a primeira imagem é a do topo. Não é possível distinguir os diversos períodos calculados numericamente uma vez que as curvas se superpõem perfeitamente. O que podemos distinguir no gráfico são as

duas curvas, numérica e exata. Isso se deve, principalmente, ao fato de que a curva exata foi calculada para um número maior de pontos, ao passo que a numéricas, por limitações computacionais, foi calculada para 17×17 pontos em todo o intervalo coberto pela figura. Apesar dessa concordância não tão perfeita, julgamo-la bastante satisfatória e suficiente para que o nosso objetivo de observar o comportamento do pacote para acoplamento não-nulo seja alcançado.

Para acoplamento não-nulo o pacote evolui como indicado na figura 6.2 abaixo. Nessa figura, o pacote foi evoluído para um acoplamento $\lambda = 0.05$. Como na figura 6.1 anterior, o intervalo de tempo entre cada imagem presente no gráfico é de um quarto de período, e a primeira imagem é a preta do topo. Foi feita a evolução por quatro períodos completos. O primeiro período está em preto, o segundo em vermelho, o terceiro verde e o quarto em azul. Observamos que houve um atraso evidente (que está de acordo com a correção de Born-Oppenheimer) para os dois autoestados do Nelson ($Nel = 0$ e $Nel = 29$) utilizados, e em nenhum caso houve dissipação visível. Vale destacar que o primeiro autoestado do Nelson utilizado, o estado fundamental, tem uma energia (0.02186) para a qual o comportamento do análogo clássico do sistema é regular, enquanto que o segundo autoestado utilizado tem energia 0.13025, de modo que o análogo clássico tem comportamento misto. Na figura 6.3 estão expostos os gráficos da evolução temporal para $Nel = 0$ e $Nel = 29$, também para quatro períodos, mas usando o período ($\tilde{\tau} = 2\pi/\tilde{\omega}$) obtido pela correção de Born-Oppenheimer. Podemos observar que as curvas se superpõem quase perfeitamente, de modo que a referida correção se mostra perfeitamente aplicável ao problema e fica evidente que não há dissipação — caso houvesse as curvas de períodos superiores se deslocariam rumo ao centro do gráfico. Observamos, ainda, que não há qualquer deformação do pacote.

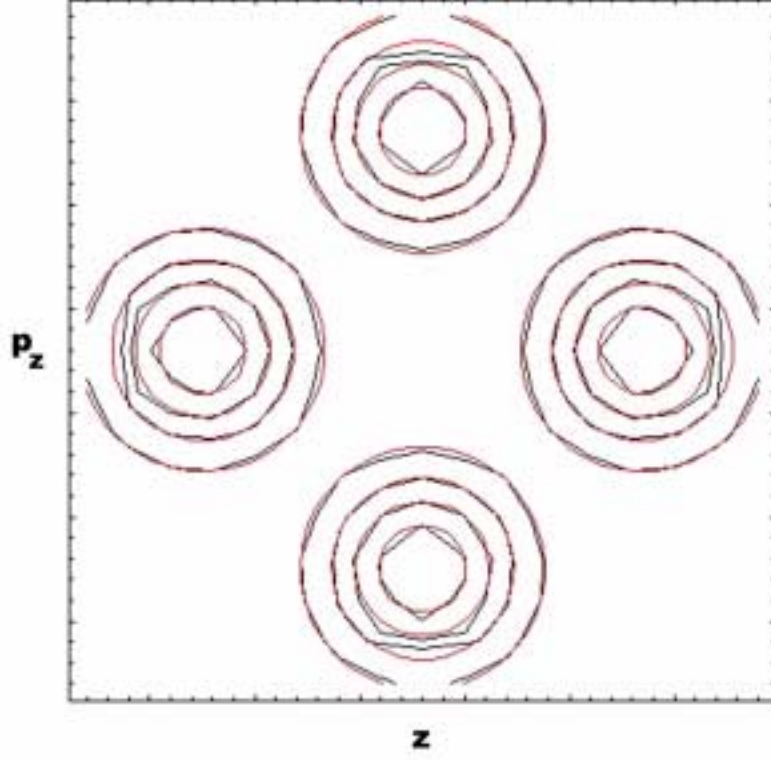
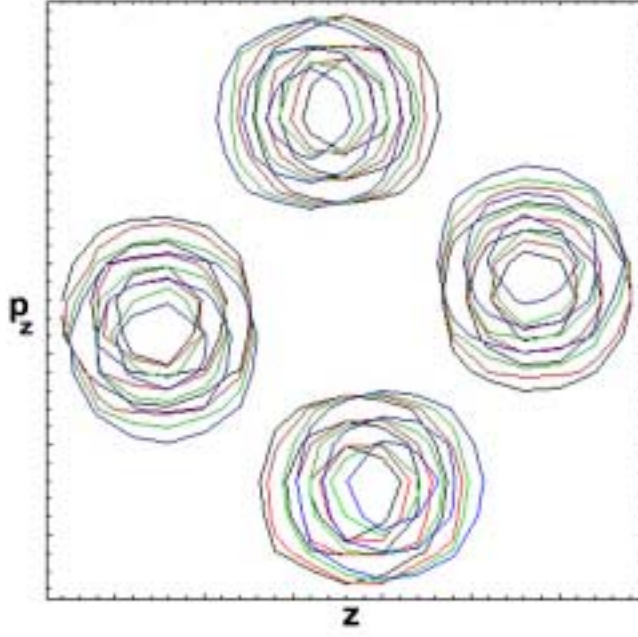
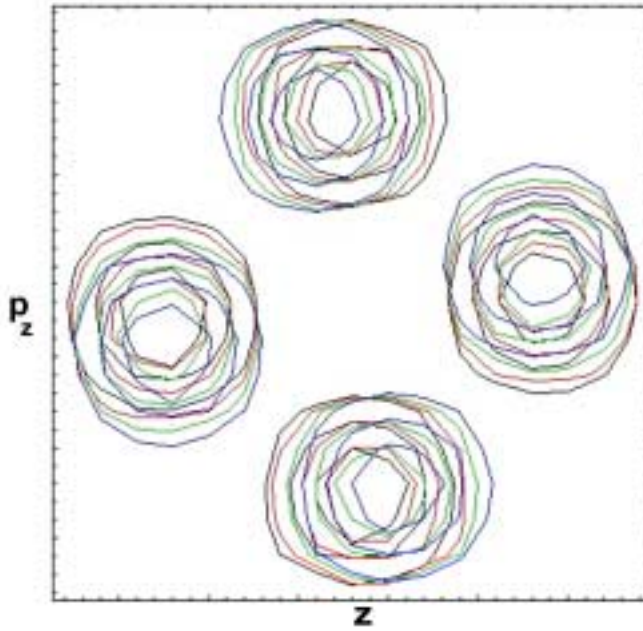


Fig 6.1: Evolução temporal de um estado coerente do oscilador harmônico *desacoplado do Nelson*. Em preto estão os estados coerentes calculados numericamente e os pacotes em vermelho são estados coerentes exatos, obtidos pelo *software Mathematica*. No sentido horário, partindo do topo, os pacotes representam a evolução em $t = 0, \tau/4, \tau/2$ e $3\tau/4$, respectivamente, onde $\tau = 2\pi/\omega$ é o período do movimento harmônico. Os parâmetros usados foram: $|u|^2 = 5.5$, $z_0 = 0$, $\omega = 0.25$ e $\hbar = 0.025$.

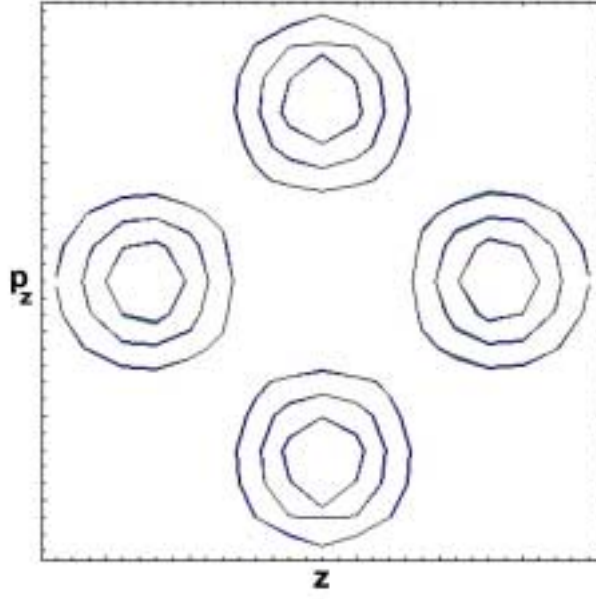


(a)

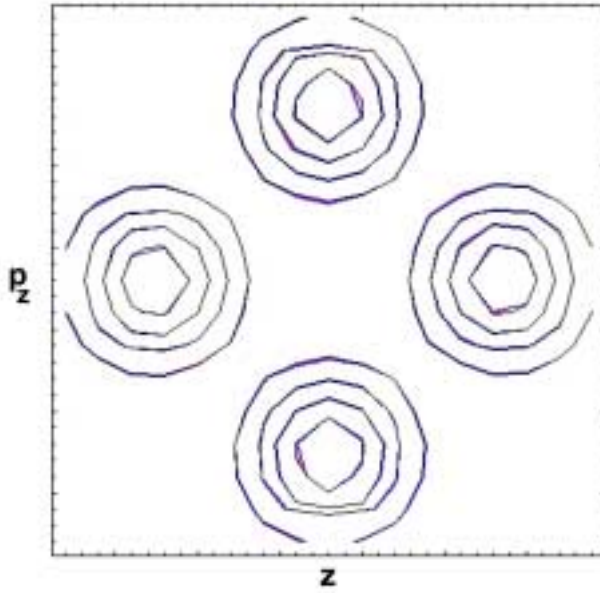


(b)

Fig 6.2: Evolução temporal de um estado coerente do oscilador harmônico para $\lambda = 0.05$. No sentido horário, partindo do topo, os pacotes representam a evolução em $t = 0, \tau/4, \tau/2, 3\tau/4$ e assim por diante, até $3\tau/4 + 4\tau$, onde $\tau = 2\pi/\omega$ é o período do movimento harmônico. O primeiro período está indicado pelas curvas em preto, o segundo em vermelho, o terceiro em verde, e o quarto em azul. Os parâmetros usados foram: $|u|^2 = 5.5, z_0 = 0, \omega = 0.25, \hbar = 0.025, \lambda = 0.05$ e (a) $Nel = 0$ (b) $Nel = 29$



(a)



(b)

Fig 6.3: Evolução temporal de um estado coerente do oscilador harmônico para $\lambda = 0.05$. No sentido horário, partindo do topo, os pacotes representam a evolução em $t = 0, \tilde{\tau}/4, \tilde{\tau}/2, 3\tilde{\tau}/4$ e assim por diante, até $3\tilde{\tau}/4 + 4\tilde{\tau}$, onde $\tilde{\tau} = 2\pi/\tilde{\omega}$ é o período do movimento harmônico corrigido segundo a aproximação de Born-Oppenheimer. O primeiro período está indicado pelas curvas em preto, o segundo em vermelho, o terceiro em verde, e o quarto em azul.

Os parâmetros usados foram: $|u|^2 = 5.5$, $z_0 = 0$, $\omega = 0.25$, $\hbar = 0.025$, $\lambda = 0.05$ e

(a) $Nel = 0$

(b) $Nel = 29$

6.3.2 As energias médias

Como mencionamos no início deste capítulo, é de nosso interesse estudar o comportamento das energias médias em função do tempo. Para isso, calculamos numericamente

as energias do Nelson, do oscilador harmônico e de interação (e a energia total, soma das três), usando as fórmulas apresentadas na seção anterior. Apresentaremos as energias médias para os mesmos parâmetros que foram usados nas visualizações dos pacotes, presentes nas figuras acima.

Como sempre, iniciamos nossa exposição com o caso desacoplado ($\lambda = 0$). A figura 6.4 abaixo mostra, num mesmo sistema de eixos, as energias médias de interesse. De cima para baixo temos a energia total, a do Nelson e a do oscilador harmônico. Observamos que, como era de se esperar, todas as energias ficaram constantes, mantendo seus valores iniciais.

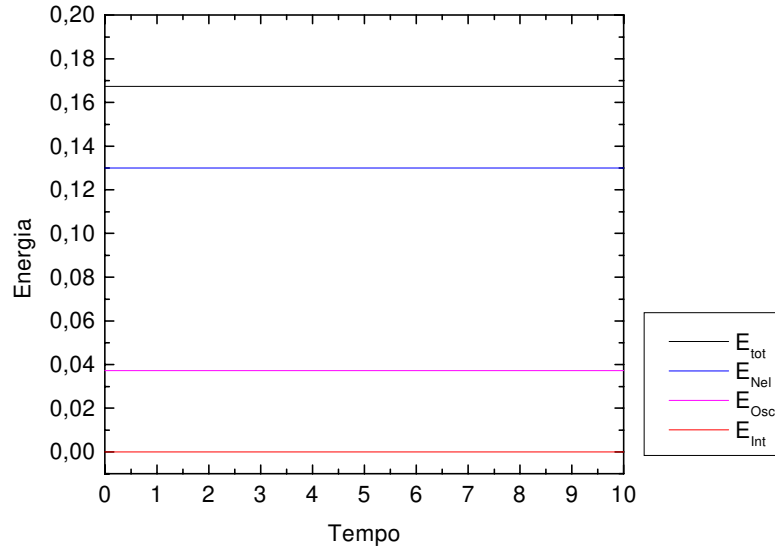


Fig 6.4: Energias médias em função do tempo do Nelson, do oscilador harmônico, de interação e total. O tempo está em unidades de período do oscilador ($2\pi/\omega$). Os parâmetros usados foram: $|u|^2 = 5.5$, $z_0 = 0$, $\omega = 0.25$, $\hbar = 0.025$, $\lambda = 0$ e $Nel = 29$. Nesse caso desacoplado, as energias ficaram constantes em seus valores iniciais: $E_{Nel} = 0,130$, $E_{Osc} = 0,037$, $E_{Int} = 0$ e $E_{tot} = 0,167$.

Na figura 6.5 estão as energias para acoplamento $\lambda = 0.05$ e $Nel = 29$ e os mesmos parâmetros e autoestados do Nelson da figura 6.2. Observamos que as oscilações (cau-

sadas por erros numéricos) na energia total são quase imperceptíveis. Da figura 6.5 não podemos, de forma alguma, concluir que haja qualquer perda ou ganho irreversível de energia na interação entre os sistemas. Tanto a energia do Nelson quanto a do oscilador parecem oscilar em torno de uma média constante. A única observação que se pode fazer é que há trocas reversíveis de energia, reveladas pelas oscilações que, principalmente para o Nelson, parecem se intensificar a partir do sexto período.

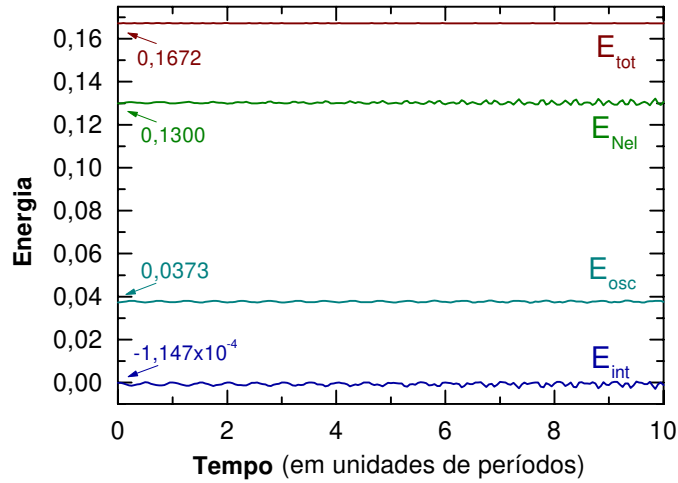
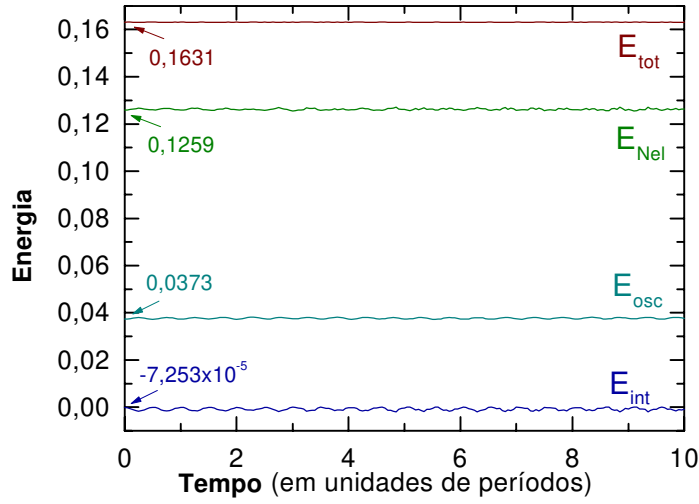


Fig 6.5: Energias médias

em função do tempo: do Nelson, do oscilador harmônico, de interação e total. O tempo está em unidades de período do oscilador. Os parâmetros usados foram: $|u|^2 = 5.5$,

$z_0 = 0$, $\omega = 0.25$,

$\hbar = 0.025$, $\lambda = 0.05$ e

(a) $N_{el} = 28$,

(b) $N_{el} = 29$.

Os valores iniciais das energias (calculados numericamente) estão indicados no gráfico e os valores "exatos" são $E_{Osc} = 0,0375$ e

(a) $E_{Nel} = 0,1261$,

(b) $E_{Nel} = 0,1303$.

Na figura 6.6 abaixo ilustramos as energias médias de alguns níveis do Nelson em função do tempo. Da figura pode-se concluir que as energias oscilam sem uma mudança significativa em seus valores e sem inverter permanentemente a ordem dos níveis.

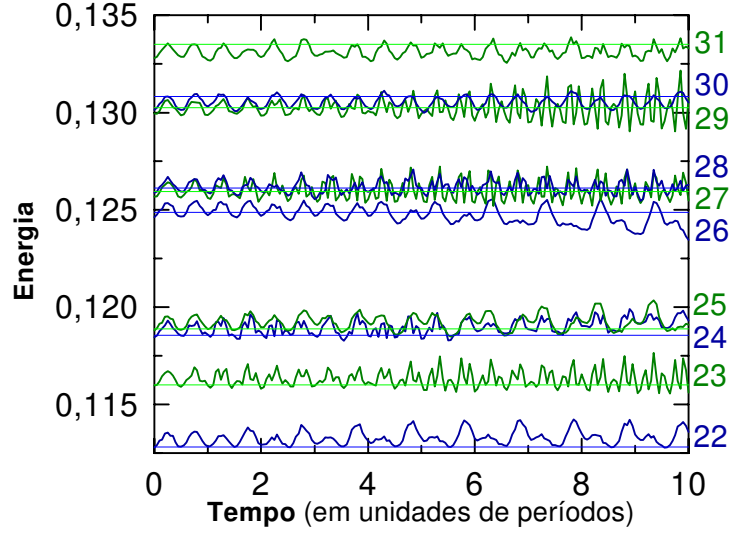
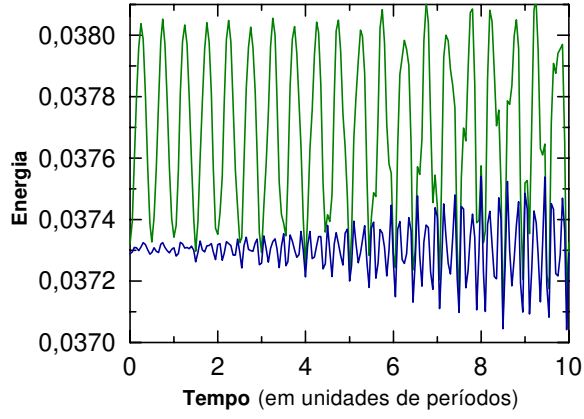


Fig 6.6: Energias médias de alguns níveis do Nelson em função do tempo .

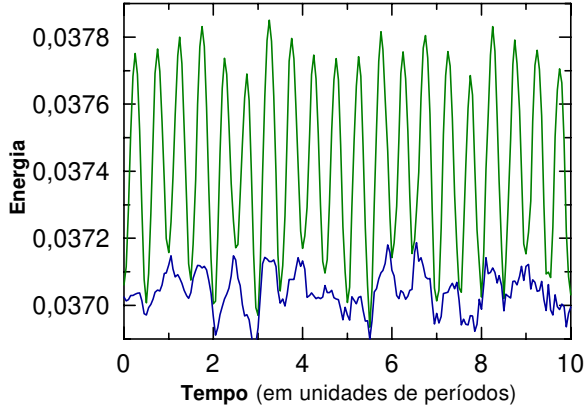
O tempo está em unidades de período do oscilador ($2\pi/\omega$). Os parâmetros usados foram: $|u|^2 = 5.5$, $z_0 = 0$, $\omega = 0.25$, $\hbar = 0.025$ e $\lambda = 0.05$.

As linhas retas indicam as energias dos níveis correspondentes no espectro do Nelson (desacoplado).

Na figura 6.7 seguinte, apresentamos os gráficos da energia do oscilador renormalizada para dois valores do Nelson, juntamente com a energia do oscilador sem a renormalização. Observamos, em ambos os casos, que há oscilação nessa energia, mas bem menor que a apresentada pela energia do oscilador harmônico. Embora a energia varie um pouco com o tempo, não se pode afirmar que haja dissipação de um sistema para o outro, mas sim uma troca reversível de energia.



(a)



(b)

Fig 6.7: Energias médias do oscilador harmônico com e sem renormalização em função do tempo. O tempo está em unidades de período corrigido, $\tilde{\tau}$, do oscilador. Os parâmetros usados foram:

$$|u|^2 = 5.5, \omega = 0.25,$$

$$\hbar = 0.025, \lambda = 0.05 \text{ e}$$

$$(a) \text{ } Nel = 29,$$

$$(b) \text{ } Nel = 31.$$

Em ambos os gráficos, a curva verde corresponde à energia E_z do oscilador, enquanto que a curva azul representa a energia renormalizada E_{z_r} .

Capítulo 7

Conclusões

Como discutimos no capítulo 6, não obtivemos dissipação de energia de um subsistema para o outro, mas apenas troca reversível de energia. Também não pudemos observar deformações apreciáveis do pacote — o que ficou evidente quando corrigimos o período segundo a aproximação de Born-Oppenheimer, pois foi possível verificar que os pacotes se sobrepuseram quase que perfeitamente depois de um período corrigido. Observemos que nem o fato de não estarmos num regime perfeitamente adiabático provocou esses efeitos.

Na figura 4.7a observamos que as oscilações da energia renormalizada vão se acentuando com o tempo, conforme é sugerido pela equação 2.5: $\langle \Delta E^2 \rangle = 2Dt$. Isso indica que, apesar de $\langle \Delta E \rangle = 0$, $\langle \Delta E^2 \rangle$ apresenta um comportamento tipicamente difusivo! Não é claro no momento por quê esse fato não altera os valores médios da trajetória do pacote.

Algumas dificuldades computacionais impediram uma exploração maior do problema. Como já observamos nos capítulos 4 e 5, tivemos que limitar os tamanhos das matrizes, mas ao mesmo tempo precisávamos atingir uma energia para a qual o Nelson já apresentava um comportamento fortemente caótico. O oscilador harmônico, por sua vez, não podia ter seu nível de energia mais alto muito maior que isso, porque nesse caso ficariam faltando níveis quando acoplássemos os dois sistemas. Tivemos então que compensar a

limitação no tamanho da base do oscilador com o aumento de ω — truncamos a base no seu trigésimo termo e escolhemos $\omega = 0.25$, de modo a atingirmos uma energia máxima 0.184. Por essa razão, não nos foi possível atingir um regime realmente adiabático.

Conforme já foi dito no capítulos 1 e 3, Túlio de Carvalho e M. A. M. de Aguiar [5, 6] não usaram o oscilador harmônico como sistema lento, mas o oscilador quártico. O que os levou a usar esse sistema foi uma limitação que o oscilador harmônico oferece à magnitude do acoplamento: para que o sistema não se comporte como se o potencial harmônico estivesse ‘de cabeça para baixo’ devemos ter

$$\lambda < \omega.$$

No nosso caso, também há uma limitação desse tipo ($\lambda^2 < 2\omega^2$, como pode ser visto pela equação 6.18), mas não nos ofereceu problemas porque o valor de ω não pode assumir um valor muito pequeno devido às limitações computacionais. Seria, contudo, interessante, também para a análise quântica, um estudo usando o oscilador quártico como sistema lento, pois além de ser mais fácil torná-lo adiabático, ele não possui um estado coerente, possibilitando o surgimento de efeitos mais interessantes.

Ainda nesse sentido, tendo em vista a simplicidade da dinâmica do oscilador harmônico, surge a pergunta: o fato de não ter havido nada com o pacote, de a correção de Born-Oppenheimer para o período ter sido tão boa, é devido ao teorema adiabático ou à harmonicidade?

Como perspectivas para essa linha de pesquisa, surge o oscilador quártico como sub-sistema lento. Pelas razões expostas nos parágrafos anteriores, ele possibilitaria possivelmente uma investigação mais conclusiva desse representativo problema.

Bibliografia

- [1] A. O. Caldeira e A. J. Leggett. *Influence of Dissipation on Quantum Tunneling in Macroscopic Systems*, Phys. Rev. Lett, **46**, 211 (1981).
- [2] A. O. Caldeira. *Alguns Aspectos da Dinâmica Quântica de uma Partícula Browniana*, Notas de Física 7, IFGW-UNICAMP (1994).
- [3] M. Wilkinson. *Dissipation by Identical Oscilators*, J. Phys. A **23**, 3603 (1990).
- [4] M. Berry e J. Robbins. *Chaotic Classical and Half-Classical Adiabatic Magnetism and Deterministic Friction*, Proc. R. Soc. Lond. A **442**, 659 (1993).
- [5] T. O. de Carvalho. *A Dinâmica Caótica como Mecanismo de Dissipação — o Papel das Órbitas Periódicas*, Tese de Doutorado, IFGW-UNICAMP (1996).
- [6] T. O. de Carvalho e M. A. M. de Aguiar. *Classical Chaos as an Environment for Dissipation*, Phys. Rev. Lett. **76**, 2690 (1996).
- [7] K. J. Laidler. *The Meaning of “Adiabatic”*, Can. J. Chem. **72** 936 (1994).
- [8] M. Berry. ‘*Regular and Irregular Motion*’ in *Topics in Nonlinear Dynamics*, editado por S. Jorna (Am. Inst. Phys. Conf. Proc. **46**, 1978).
- [9] M. Hénon. ‘*Numerical Exploration of Hamiltonian Systems*’ in *Les Houches*, XXXVI (1981).
- [10] E. Ott. *Chaos in Dynamical Systems*, Cambridge Univ. Press, 1993.

- [11] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, 1980.
- [12] L. D. Landau e E. M. Lifshitz. *Mechanics*, Course of Theoretical Physics, vol 1, Pergamon Press, Oxford, 1976.
- [13] P. Lochak, C. Meunier. *Multiphase Averaging for Classical Systems*, Springer, New York, 1988.
- [14] R. Brown, E. Ott, C. Grebogi. *The Goodness of Ergodic Adiabatic Invariants*, J. Sta. Phys. **49** 511 (1987).
- [15] A. O. Caldeira. *Notas de Aula de Mecânica Quântica II - Unicamp*, 1998.
- [16] D. J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, 1994.
- [17] L. I. Schiff. *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1968.
- [18] M. Baranger e K. T. R. Davies. *Periodic Trajectories for a Two-Dimensional Non-integrable Hamiltonian*, Ann. Phys. **177**, 330 (1987).
- [19] J. H. Mahoney. *Periodic Classical Trajectories and Bound Quantum States*, Doctor's Thesis, MIT, 1987.
- [20] D. Provost. *The Signature of Classical Periodic Orbits on Quantum Wavefunctions*, Doctor's Thesis, MIT, 1992.
- [21] S. D. Prado. *Propriedades Magnéticas de um Gás de Elétrons Semiclássico*, Tese de Doutorado, IFGW - UNICAMP, 1995.
- [22] I. S. Gradshteyn, e I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press, 1980.
- [23] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1994.
- [24] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloë. *Quantum Mechanics* vol 1, Wiley-Interscience, Paris, 1977.

- [25] A. M. Ozório de Almeida. *Caos na Mecânica Quântica*, Ciência Hoje, **14**, 80, p. 48 (1992).
- [26] A. M. Ozório de Almeida. *Sistemas Hamiltonianos: Caos e Quantização*, Editora da UNICAMP, Campinas, 1987.